

Extraction de faisceaux d'ions à partir de plasmas neutres : modélisation et simulation numérique

Thierry Pougeard-Dulimbert

▶ To cite this version:

Thierry Pougeard-Dulimbert. Extraction de faisceaux d'ions à partir de plasmas neutres : modélisation et simulation numérique . Analyse numérique [math.NA]. Université Pierre & Marie Curie - Paris 6, 2001. Français. NNT: . tel-01483017

HAL Id: tel-01483017 https://theses.hal.science/tel-01483017v1

Submitted on 4 Mar 2017

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.



Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial - NoDerivatives 4.0 International License

THESE de DOCTORAT de l'UNIVERSITE PARIS 6

Spécialité :

Analyse Numérique

présentée par

Thierry POUGEARD DULIMBERT

pour obtenir le grade de DOCTEUR de l'UNIVERSITE PARIS 6

Sujet de la thèse :

Extraction de Faisceaux d'Ions à partir de Plasmas Neutres : Modélisation et Simulation Numérique.

soutenue le 27 mars 2001

après avis des rapporteurs :

M. Pierre DEGOND Université Toulouse 3M. Norbert MAUSER Universität Wien (Autriche)

devant le jury composé de :

M Pierre DEGOND	Professeur, Université Toulouse 3	Rapporteur
M. Bruno DESPRES	Ingénieur-Chercheur, CEA	Examinateur
Mme Edwige GODLEWSKI	Université Paris 6	Invitée
M. Guy LAVAL	Ecole Polytechnique	Président
M. Jean-Louis LEMAIRE	Ingénieur-Chercheur, CEA	$\operatorname{Examinateur}$
M. Pierre-Arnaud RAVIARD	Ecole Polytechnique	Directeur de thèse
M. Jacques SEGRE	Ingénieur-Chercheur, CEA	$\operatorname{Examinateur}$

Résumé

Cette thèse est consacrée à l'étude et à la simulation numérique de dispositifs d'extraction de faisceaux d'ions. Elle est constituée de deux parties distinctes.

La première partie traite d'un dispositif d'extraction d'un faisceau d'ions à partir d'un plasma. La difficulté réside dans la transition entre la zone plasma et le faisceau. Le modèle de plasma consiste en une équation cinétique ionique munie d'un terme source d'ionisation simplifié, couplée à des électrons Boltzmaniens et à l'équation de Poisson pour le potentiel électrostatique. Pour limiter la simulation sur le plasma, très coûteuse, on y définit une frontière émissive fictive. Dans le cas monodimensionnel, la réduction du système à une équation de Poisson non linéaire et l'étude de la limite quasi-neutre donnent les conditions limites sur cette frontière. Les simulations numériques bidimensionnelles utilisent une méthode particulaire de type PIC, l'originalité du travail consistant en la prise en compte des conditions d'injection singulières. Un algorithme de coalescence est développé. Des validations sur des cas réalistes sont proposées.

La seconde partie s'intéresse à l'expansion d'un plasma créé par l'impact d'un faisceau d'électrons sur une anode (plasma à spot anodique). Le modèle proposé est constitué des équations de conservation sur les électrons, les ions positifs et les neutres. Un certain nombre d'hypothèse permet de se ramener à un système de cinq équations de conservation. Une perte locale d'hyperbolicité, appelée "résonnance non linéaire", est mise en évidence. La difficulté de la résolution (cas monodimensionnel) réside dans la transition entre la zone de chauffage du plasma par le courant extérieur et la zone de détente du plasma dans le vide. La résonnance non linéaire se traduit par un comportement non physique de la solution. Pour pallier cet inconvénient, la transition est traitée comme une interface, à l'aide de la définition d'un flux numérique original.

Abstract

This thesis is dedicated to the study and the numerical computation of ion beams extraction devices. It is made of two distintcts parts.

In the first part, we consider the extraction of an ion beam from a plasma. The difficulty lies in the transition between the plasma area and the beam. The model of plasma consists in a kinetic Vlasov's equation for the ions with a simplified ionisation term, coupled with Boltzmanian electrons and with the Poisson's equation for the electrostatic potential. In order to reduce the cost of the simulation in the plasma, an artificial emissive boundary is defined there. In the one-dimensional case, the reduction of the system to a nonlinear Poisson's equation and the study of the quasi-neutral limit gives the boundary conditions. A particle PIC method is used for the bidimensional numerical computations. The main feature of this work consists in dealing with singular injection conditions. An algorithm of coalescence is developed. Validations on realistic cases are presented. The second part treats of the expansion of a plasma created by the impact of an electron beam on an anode. The model which is proposed is made of conservation laws on electrons, positive ions and neutrals. Some hypothesis allow to come up to a five equations system. A local loss in hyperbolicity, called "non linear resonance", is shown. The difficulty in solving the one-dimensional system lies in the transition between the area where the plasma is heated by the external current and the expansion area of the plasma in vacuum. The nonlinear resonance involves a non physical behaviour of the solution. To cope with this problem, the transition is treated as an interface, thanks to the definition of an original numerical flux.

Avertissement sur ce document

Ce manuscrit de thèse n'a été publié à l'origine, en 2001, que sous format papier. Le présent document électronique a été généré en 2010, et a nécessité un certain nombre de manipulations, notamment sur les fichiers images : la qualité de certaines figures et résultats peut s'en ressentir.

Table des matières

In	trod	uction					
	0.1	Les faisceaux d'ions et la simulation numérique					
	0.2	Première partie : modélisation de l'extraction d'un faisceau d'ions					
		0.2.1 Contexte de l'étude					
		0.2.2 Description de la source d'ions et définitions					
		0.2.3 Méthodologie et résolution numérique					
	0.3	Deuxième partie : modélisation d'un plasma d'anode					
		$0.3.1 \text{Cadre de l'étude} \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $					
		0.3.2 Description de la source d'ions					
		0.3.3 Etablissement d'un modèle et résolution numérique					
Ι	$\mathbf{E}\mathbf{x}$	traction d'un faisceau d'ions 19					
1	Mo	délisation de la source 23					
	1.1	Introduction					
	1.2	Construction du modèle d'extraction					
		1.2.1 Le champ électrique $\ldots \ldots 2^{4}$					
		1.2.2 Les électrons $\ldots \ldots 2^{4}$					
		1.2.3 Les ions					
		1.2.4 Définition du problème de Vlasov-Poisson					
	1.3	Calcul du potentiel plasma					
	1.4	Adimensionnement du modèle					
	1.5	Définition du domaine d'étude					
2	Etu	de monodimensionnelle : détermination des conditions limites sur					
	Γ_i						
	2.1	Introduction					
2.2		Réduction à un domaine monodimensionnel plan					
	2.3	Détermination des conditions aux limites sur le potentiel					
		2.3.1 Réduction à un problème de Poisson non linéaire					
		2.3.2 Résolution numérique de l'équation différentielle					
	- ·	2.3.3 Résultats et interprétations					
	2.4	Conditions aux limites sur la fonction de distribution f_i					

		2.4.1 2.4.2 2.4.3 2.4.4	Approximation quasi-neutre 47 Compatibilité avec le problème de Poisson non linéaire 57 La fonction de distribution de l'approximation quasi-neutre 57 Approximation de gaine 57					
	2.5	2.4.4 Applic 2.5.1 2.5.2	$\begin{array}{llllllllllllllllllllllllllllllllllll$					
	2.6	Conclu	1sion					
3	Résolution numérique du système adimensionné 63							
	3.1	Introd	uction \ldots					
	3.2	Rappe	l du problème adimensionné					
	3.3	Descri	ption de la méthode PIC					
		3.3.1	Principe de la méthode et notations					
		3.3.2	Cycle sur une itération					
		3.3.3	Choix des pas d'espace et de temps					
	3.4	Traite	ment de l'injection des particules					
		3.4.1	Méthode d'injection classique					
		3.4.2	Correction de l'injection : suppression des particules lentes					
	3.5	Traite	ment de l'ionisation					
	3.6	Résolu	tion de l'équation de Poisson					
		3.6.1	Discrétisation et linéarisation					
		3.6.2	Résolution du système linéaire					
	3.7	Coales	cence des particules $\ldots \ldots $					
		3.7.1	Conservation des moments sur les particules					
		3.7.2	Cas monodimensionnel					
		3.7.3	Cas bidimensionnel					
	3.8	Partic	ularités pour une géométrie axisymétrique. Coordonnées cylindriques 101					
		3.8.1	Calcul du poids des particules					
		3.8.2	Calcul de la densité aux nœuds					
		3.8.3	Résolution de l'équation de Poisson					
	3.9	Conclu	1sion					
4	Rés	ultats	107					
	4.1	Introd	uction $\dots \dots \dots$					
	4.2	Valida	tion 1D \ldots					
	$^{-}_{4.3}$	Résult	ats bidimensionnels sur la diode modèle					
	4.4	Applic	a tion à un cas réaliste \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots 118					
	-	4.4.1	Structure du code MEFISTO					
		4.4.2	Description du cas de référence					
		4.4.3	Définition d'un cas test					
		4.4.4	Résultats de la simulation					
		4.4.5	Effet de l'ionisation					

	4.5	Conclusion	123
Co	onclu	ision de la première partie	135
II	\mathbf{N}	Iodélisation d'un plasma d'anode	137
5	Eta	blissement des modèles et propriétés	141
	5.1	Introduction	141
	5.2	Modèle global	142
		5.2.1 Lois de conservation \ldots	143
		5.2.2 Hyperbolicité du modèle	149
		5.2.3 Ecriture conservative : passage en entropie	154
	5.3	Etablissement d'un modèle totalement ionisé	157
		5.3.1 Elaboration du modèle simplifié	157
		5.3.2 Propriétés mathématiques du système	159
		5.3.3 Détermination des conditions limites à gauche	161
	5.4	Conclusion	163
6	\mathbf{R} és	solution numérique en 1D du modèle totalement ionisé	165
	6.1	Introduction	165
	6.2	Description du problème	166
		6.2.1 Description du problème et notations	166
	6.3	Définition du courant extérieur	168
	6.4	Traitement de la couche limite	169
	6.5	Traitement de l'expansion dans le vide	171
	6.6	Calcul du flux numérique par une méthode sans couplage	174
		6.6.1 Schéma HLLE	174
		6.6.2 Application	178
	6.7	Méthode de couplage de schémas	184
		6.7.1 Principe du couplage	184
		6.7.2 Estimation d'erreur	186
		6.7.3 Validation de la méthode	188
\mathbf{A}	Cal	cul des fréquences de collision	197
В	Tra	itement de conditions limites absorbantes	199
C. Couplage de deux systèmes hyperboliques			
÷	C 1 Introduction		
	C.2	Un résultat scalaire	204
	C.3	Un résultat de type Lax-Wendroff	205
	C.4	Application au schéma HLLE	209

Bibliographie

_

4

Introduction

0.1 Les faisceaux d'ions et la simulation numérique

L'utilisation de faisceaux d'ions recouvre de nombreux domaines dans l'industrie ou dans la recherche :

• Le traitement de surface : il s'agit de recouvrir un matériau 'récepteur' par un mince film de surface composé de métaux (ou d'alliages) ; un faisceau d'ions bombarde une cible composée du métal à déposer, et les neutres arrachés de la cible se déposent sur le substrat du récepteur à recouvrir.

• La gravure, utilisée en micro-électronique pour la fabrication de circuits intégrés : un masque représentant le circuit est déposé sur un film, et l'ensemble est bombardé par un faisceau d'ions qui érode le film non protégé par le masque, qui est ensuite retiré [13].

Plus spécifiquement, des faisceaux d'ions légers peuvent être utilisés pour :

• La production de neutrons ; nous reviendrons sur cette application qui est à l'origine des travaux présentés dans cette thèse.

• La fusion par confinement inertiel, pour laquelle une des voies de recherche consiste à utiliser un faisceau d'ions légers dont l'énergie est convertie en rayonnement X, renvoyé sur la cible (attaque indirecte) [4].

La technique générique utilisée pour produire un faisceau d'ions est la suivante : la source est un plasma neutre, composé de particules neutres (atomes ou molécules), d'ions et d'électrons, confiné dans une enceinte percée d'un orifice d'extraction. Le plasma est créé et entretenu par ionisation à partir d'un gaz, qui peut être ionisé par différents moyens, tels qu'une décharge, un courant électronique ou la résonnance cyclotron électronique. Une ou plusieurs électrodes, situées à l'extérieur de l'enceinte, permettent d'imposer un champ électrique extérieur qui repousse les électrons et attire les ions hors du plasma pour former un faisceau. Ce dernier doit respecter un certain nombre de contraintes. Il faut dans un premier temps que la densité de courant soit la plus élevée possible, c'est-à-dire en particulier que le rendement (énergie déposée divisée par l'énergie consommée) soit suffisamment bon. La divergence du faisceau (l'angle formé par la direction des particules et l'axe de propagation) doit rester faible si on veut focaliser le faisceau sur un point donné, ou le propager sur de longues distances; il est notamment indispensable d'éviter que les ions ne frappent les électrodes, qui risqueraient alors d'être rapidement détériorées. Pour maintenir ces caractéristiques, il faut également veiller à ce que le plasma demeure stable au sein de l'enceinte. Pour les contrôler, on peut jouer

d'une part sur le plasma (sa température, sa densité), d'autre part sur les qualités du système optique (forme et épaisseur des électrodes, potentiels appliqués, dimensions du système). Les études menées dans ce domaine ont montré que la densité de courant du faisceau dépend essentiellement des caractéristiques du plasma, alors que ses propriétés géométriques sont plus influencées par le système d'extraction [29].

Les réglages nécessaires pour obtenir le meilleur faisceau sont complexes et nécessitent l'utilisation de la simulation numérique afin d'optimiser les caractéristiques du plasma et du système optique. Les phénomènes physiques qui entrent en jeux sont nombreux (phénomènes d'ionisation, collisions, propagation de particules chargées, calculs de champs, ...), souvent tridimensionnels : il semble impossible d'en réaliser une modélisation exhaustive dans le but de proposer un code de simulation adapté à toutes les sources d'ions. Il s'agit plutôt de réaliser une modélisation adaptée à une source d'ions donnée.

Les outils numériques utilisés dans ces simulations sont ceux mis en œuvre pour reproduire le déplacement de particules chargées dans un champ électromagnétique; ils peuvent donc être utilisés pour d'autres problèmes que l'étude de faisceaux d'ions. Des équations de transport et d'interactions entre particules (Vlasov, Fokker-Planck, Euler, ...) sont couplées aux équations de Maxwell. Des hypothèses complémentaires (absence de champ magnétique) peuvent simplifier ces dernières. Pour les équations qui décrivent le comportement des particules, deux classes de modèles peuvent être distinguées :

• la première est l'approche *hydrodynamique*; elle est utilisée pour des plasmas dans lesquels les collisions dominent. L'évolution du plasma est étudiée de manière globale, en utilisant des systèmes de lois de conservation. La résolution de ces équations est relativement peu coûteuse en temps et en capacité mémoire; cette méthode permet de décrire le comportement macroscopique d'un système, mais ne peut pas rendre compte de phénomènes microscopiques, comme par exemple les croisements de particules qui se produisent lors de la focalisation d'un faisceau; elle est bien adaptée à l'étude de plasmas au repos, ou tout au moins pour lesquels les comportements transverses sont négligeables.

• la seconde est l'approche cinétique : chaque espèce de particule est modélisée par une fonction de distribution dans l'espace des phases (position-vitesse). Cette fonction est solution d'une équation aux dérivées partielles, telle que l'équation de Vlasov, ou l'équation de Fokker-Planck si on veut prendre en compte des collisions entre particules chargées. Ces modèles *cinétiques* sont adaptés à une étude plus fine, mais sont en contrepartie beaucoup moins économiques dans leur mise en œuvre.

Ce document est consacré à l'étude de la génération de faisceaux d'ions et des plasmas dont ils sont extraits, et se compose de deux parties bien distinctes, que ce soit au niveau des dispositifs étudiés, de la modélisation envisagée ou des méthodes de simulations numériques employées. Dans la première partie, une frontière artificielle fixe permet de modéliser l'extraction d'un faisceau à partir d'un plasma de décharge, et nous cherchons à déterminer les caractéristiques de cette frontière. Le modèle cinétique utilisé est basé sur la résolution auto-consistante du système de Vlasov-Poisson par une méthode particulaire. La validation de cette technique conduit à étudier plus généralement tout le dispositif de génération du faisceau (plasma + électrodes extractrices). La deuxième partie est consacrée à la modélisation beaucoup plus exhaustive d'un plasma d'hydrogène créé par interaction entre un faisceau d'électrons et une électrode composée d'hydrure de titane. Un modèle hydrodynamique permet de prendre en compte la formation et le chauffage du plasma sous l'action du courant, puis son expansion dans le vide.

0.2 Première partie : modélisation de l'extraction d'un faisceau d'ions

0.2.1 Contexte de l'étude

Les travaux présentés dans cette première partie ont pour origine le projet TRISPAL développé par le C.E.A./D.A.M. Il s'agit de produire du tritium par capture neutronique sur des éléments lithiés. Ces neutrons sont produits par réaction de *spallation* entre un faisceau de protons très énergétiques (600 MeV) et une cible composée d'éléments lourds, typiquement du plomb. Une installation de spallation peut être décomposée en plusieurs "étages" (Fig 1) :

- une source de protons, IPHI (Injecteur de Protons à Haute Intensité), qui est l'objet de notre étude;
- une chaîne d'accélérateurs pour amener les protons à l'énergie voulue;
- une cible de spallation.



FIGURE 1 – Schématisation de l'installation TRISPAL.

Le Département de Physique Théorique et Appliquée (D.P.T.A.) a été particulièrement engagé dans ce projet, de par ses compétences aussi bien en matière d'accélérateurs [17] qu'en physique nucléaire (réactions dans la cible). Les recherches conduites pour ce projet ont d'autres applications, telles que des systèmes hybrides, couplant un accélérateur de particules à un réacteur sous-critique, qui présente l'avantage d'être plus sûr. L'accélérateur délivre des particules légères sur une cible de noyaux lourds à l'intérieur du réacteur afin d'initier des réactions de spallation. Les neutrons ainsi produits constituent une source neutronique externe au réacteur, permettant le maintien de son taux de réactivité malgré la sous-criticité. L'utilisation de tels systèmes est étudiée au C.E.A.. Elle est envisagée dans le cadre de la transmutation des déchets radioactifs : les neutrons produits sont utilisés pour transformer des éléments à vie longue en éléments de période radioactive plus courte. Plus généralement, une source de spallation peut intéresser tous les domaines qui utilisent des neutrons, que ce soit à des fins expérimentales, en remplacement de réacteurs qui fournissent des flux de neutrons plus faibles, ou pour de la recherche fondamentale.

Des projets de systèmes incinérateurs basés sur la spallation sont menés en Europe par le CERN (autour de C. Rubbia) ou au Japon (Institut JAERI). En Europe également, le projet E.S.S. (European Spallation Source) a pour but la réalisation d'une source intense de neutrons de spallation [47]. Des travaux équivalents sont conduits aux Etats-Unis, sous l'égide du Department Of Energy : le projet S.N.S., "Spallation Neutron Source", rassemble les compétences de plusieurs Laboratoires Nationaux : Lawrence Berkeley pour la source d'ions, Los Alamos pour l'accélérateur, Oak Ridge pour la cible, ainsi que les Laboratoires de Brookhaven et d'Argonne.

0.2.2 Description de la source d'ions et définitions



FIGURE 2 – Schéma d'un dispositif d'extraction : diode Pierce.

Un plasma est créé de manière permanente par une décharge électrique basse pression

dans de l'hydrogène gazeux. Sous l'action de cette décharge un plasma composé de molécules et d'atomes d'hydrogène, d'électrons et d'ions se forme. C'est un plasma faiblement ionisé, de faible densité (10^{17} particules par m³) et de basse température ($T_e \simeq 10^5$ K). Un dispositif d'extraction composé d'électrodes trouées de formes adaptées attire les ions hors du plasma et permet de former un faisceau de divergence optimale (Fig. 2). Le plasma source est situé en amont de la première électrode, appelée électrode plasma. Les autres électrodes sont les électrodes extractrices. La chambre à plasma est l'espace où le plasma est créé et entretenu (Fig. 3).

La formation du faisceau repose sur les principes suivants : le plasma neutre est en contact avec une paroi reliée à la masse. Les électrons du plasma ont une vitesse de dérive supérieure à celle des ions et s'éloignent donc plus vite vers la paroi, ce qui tend à briser la neutralité du plasma. Toutefois, la paroi se charge très vite négativement, et cette polarisation ralentit la fuite des électrons vers la paroi, tout en accélérant les ions, ce qui permet de maintenir la neutralité du plasma. La différence de potentiel ainsi créée entre le plasma et la paroi (notée $\Phi_c < 0$) dépend de la température électronique T_e (voir Section 1.3). Cela permet de mettre en évidence l'existence d'une zone intermédiaire entre le plasma neutre et la paroi ; l'égalité des flux sur la paroi y entraîne la perte de la neutralité, tandis qu'un équilibre est assuré par la décroissance du potentiel. Cette zone est appelée une gaine . La littérature distingue deux types de gaines : si l'électrode est reliée à la masse, ou est portée à un potentiel faiblement négatif (de l'ordre de $-kT_e/e$), on parle de gaine anodique (c'est le cas dans notre étude); si l'électrode est polarisée négativement par rapport au plasma (potentiel très petit devant $-kT_e/e$), il s'agit d'une gaine cathodique [13]. Par commodité, le potentiel est initialisé à 0 dans le plasma neutre, ce qui revient à dire que Φ_c est le potentiel de l'électrode. En allant de la chambre à plasma à l'électrode plasma, plusieurs zones peuvent alors être distinguées :

- le plasma au repos : la densité électronique n_e et la densité ionique n_i sont égales ; on y pose $n_i = n_e = n_0$, le champ électrique est nul, de même que le potentiel (par choix).
- La pré-gaine¹, où la quasi-neutralité est toujours respectée $(n_i \simeq n_e)$, mais où la densité est inférieure à n_0 et le potentiel décroît (le champ électrique reste faible). Ces deux premiers sous-domaines forment la *zone quasi-neutre*; comme cela est fait dans [11], cette zone peut être caractérisée par $\frac{|n_i - n_e|}{n_e} << 1$.
- Plus près de la paroi, on perd la neutralité tandis que le potentiel décroît de plus en plus vite; c'est la gaine définie plus haut, où $n_i > n_e$.
- Ensuite, le champ électrique extérieur attire les ions et repousse les électrons ce qui permet de définir une troisième zone, le *faisceau*, où la densité électronique s'annule $(n_e \ll n_i)$ et il n'y a plus que des ions.

Suivant la valeur des potentiel appliqués, deux situations peuvent se présenter : si le champ est faible, le plasma (ions+électrons) sort par le trou pratiqué dans la paroi et ce n'est que hors de la chambre que le faisceau est créé. La surface de séparation plasma / faisceau (appelée 'ménisque') est convexe, et le faisceau est initialement divergent (Fig. 4). Si le champ est plus important, le faisceau se forme dans la chambre, et le ménisque

^{1.} Nous définissons cette zone pour mémoire, de nombreux auteurs considérant qu'on passe directement du plasma neutre à la gaine.

est concave. Dans ce cas, le faisceau est initialement convergent.

0.2.3 Méthodologie et résolution numérique

La création d'un plasma par décharge fait appel à des mécanismes complexes qui ne sont pas encore complètement décrits et dont la modélisation semble encore hors de portée (voir par exemple [27]). Une procédure couramment retenue dans l'étude de la génération d'un faisceau consiste à se donner des conditions limites sur une surface émissive dans le plasma [5][29] [52]. Dans la lignée de ce type de méthodes, l'objectif de la première partie est de proposer et de valider un modèle d'extraction basé sur la détermination de la position d'une frontière émissive artificielle plane et immobile et des caractéristiques du plasma et du potentiel sur cette frontière. Cette méthode doit permettre de réaliser des simulations numériques dans le but d'optimiser des dispositifs d'extraction tels que celui de la Figure 2.

Afin d'exposer le modèle et la résolution numérique, nous considérons un extracteur simplifié constitué de deux électrodes planes (Fig 3). Le domaine d'étude, noté Ω , est composé du réservoir de plasma, de l'électrode plasma trouée, et d'une électrode extractrice pleine. On note Γ sa frontière, incluant la frontière émissive, notée Γ_i .



FIGURE 3 - Schéma simplifié de l'extracteur : diode modèle.

Nous supposons qu'il n'y a que trois espèces de particules : des molécules d'hydrogène, des protons et des électrons. Un modèle susceptible de prendre en compte les interactions entre les particules chargées et le champ électrique (le champ magnétique est supposé négligeable) est proposé dans le Chapitre 1. Les électrons sont considérés à l'équilibre, et vérifient l'équation de Maxwell-Boltzmann (description hydrodynamique), tandis que les ions sont représentés par leur fonction de distribution, solution de l'équation de Vlasov (description cinétique). On modélise la création d'ions par collisions entre les électrons et les molécules d'hydrogène contenues dans la chambre, ce qui se traduit par l'ajout d'un terme source ad-hoc à l'équation de Vlasov. Les particules chargées interagissent entre elles et avec le champ électrique par l'intermédiaire de l'équation de Poisson. L'adimensionnement des équations fait apparaître un paramètre qui dépend de la densité et de la température du plasma et dont les variations permettent de décrire différents types de plasmas. Nous envisageons une résolution auto-consistante de ce modèle, qui se révèle fortement non linéaire. Il convient pour cela de se donner des conditions limites sur Γ .

La difficulté consiste à déterminer ces conditions sur la partie de la frontière située dans le plasma, la surface émissive Γ_i , ce qui revient à y préciser les valeurs du potentiel et de la fonction de distribution ionique (Chapitre 2). A une certaine distance de l'électrode plasma, le comportement du plasma et celui du champ électrique sont supposés monodimensionnels, comme cela est généralement admis [29][50]. Nous nous ramenons donc à une étude 1D. Un modèle simplifié permet de ramener le système de Vlasov-Poisson à une équation de Poisson non linéaire (Section 2.3). La résolution numérique de cette équation intégro-différentielle fournit la valeur du potentiel sur Γ_i . La prise en compte d'un modèle de plasma quasi-neutre permet ensuite de calculer de manière analytique la fonction de distribution ionique solution de l'équation de Vlasov (Section 2.4). En faisant en sorte que Γ_i soit positionnée dans une zone où la neutralité du plasma est vérifiée, il est possible d'utiliser cette solution pour calculer la distribution ionique sur la frontière émissive (Section 2.5).

Une fois les conditions limites obtenues, nous recherchons une solution stationnaire du système de Vlasov-Poisson en coordonnées planes 2D ou cylindriques axisymétriques (Chapitre 3). Nous utilisons une méthode particulaire qui consiste à coupler une approximation particulaire de l'équation de Vlasov à une approximation par différences finies de l'équation de Poisson sur un maillage structuré. Un code PIC a été développé pour la résolution numérique auto-consistante de ce problème. Nous proposons une technique d'injection des particules adaptée à la fonction de distribution précédemment déterminée sur la frontière émissive Γ_i (Section 3.4), et nous prenons en compte les particules créées par ionisation (Section 3.5). La linéarisation et la résolution de l'équation de Poisson est effectuée par une méthode de Newton et un algorithme de gradient conjugué préconditionné (Section 3.6). Dans ce type de simulations, le nombre de particules peut devenir très important. Une technique de coalescence permet de réduire le nombre de particules tout en conservant l'essentiel des phénomènes à décrire (Section 3.7).

Un tel code de simulation numérique sert à effectuer une étude paramétrique qu'on confronte à l'expérience : en l'absence d'une réelle connaissance du plasma source, on fait varier le paramètre introduit lors de l'adimensionnement pour que les résultats de la simulation correspondent aux mesures expérimentales. Une fois cette étape réalisée, il est alors possible d'optimiser le dispositif d'extraction. Après voir validé la méthode d'injection et les procédures de résolution numérique, un cas test dérivé de la source d'ions SILHI du C.E.A. est proposé à titre d'application (Chapitre 4).

D'autres études faisant appel à la notion de surface émissive pour résoudre des problèmes d'extraction ont été effectuées par ailleurs. Un modèle fluide utilisant des techniques équivalentes pour déterminer les conditions d'injection sur Γ_i a été développé par S. Jaouen [26]; elle donne de bons résultats dans la zone neutre et dans la gaine. B. Bodin, dans sa thèse [5], considère que la gaine est infiniment mince, et devient une frontière libre de séparation entre le plasma neutre, pour lequel une modélisation hydrodynamique est utilisée, et le faisceau, modélisé de façon cinétique. Les caractéristiques du plasma sont calculées une fois pour toutes, puis une méthode itérative permet de calculer la forme du faisceau et la position de la surface libre. Cette méthode est appliquée sur une diode d'extraction dans un cas particulier pour lequel le champ électrique est suffisamment faible pour qu'une bulle de plasma se forme en aval de l'électrode plasma, de sorte que le faisceau est généré à l'extérieur de la chambre à plasma (ménisque convexe, Fig. 4). Aux Etats-Unis, le Laboratoire National d'Oak Ridge travaille depuis une vingtaine d'années sur l'extraction de faisceau d'ions. Les méthodes développées par J.H. Whealton placent la frontière émissive dans la gaine [50][51][55]. Le potentiel sur cette frontière, ainsi que les conditions limites sur les particules sont également calculés grâce à la résolution d'un problème 1D. Des méthodes de relaxation permettent de déterminer la solution stationnaire du système de Vlasov-Poisson : l'équation de Vlasov est résolue indirectement en calculant les trajectoires des ions et donne le terme source de l'équation de Poisson, elle-même résolue par une méthode de différences finies. Un code 3D a été développé en utilisant ces techniques [54].



FIGURE 4 – Modèle développé dans [5] : cas d'un menisque convexe.

0.3 Deuxième partie : modélisation d'un plasma d'anode

0.3.1 Cadre de l'étude

Nous considérons maintenant une source de protons à arc sous vide. Cette source diffère dans son principe de celle étudiée dans la première partie : un plasma d'hydrogène est créé au voisinage d'une électrode et se détend dans le vide jusqu'à ce qu'un champ électrique extérieur sépare les protons des électrons. Le fonctionnement de telles sources, qui sont utilisées dans certains dispositifs industriels, n'est pas parfaitement compris : dans le but de mieux décrire ces sources, leur modélisation en vue de simulations numériques fait l'objet d'une étude entreprise au Département de Physique Théorique et Appliquée. L'approche est différente de ce qui est fait dans la première partie, où la définition d'une surface d'émission artificielle permet de compenser le manque d'information sur le plasma de décharge. Nous disposons de plus de connaissances quant aux mécanismes qui régissent la formation du plasma, ce qui permet d'en envisager une modélisation plus complète.

0.3.2 Description de la source d'ions

C'est une source d'ions "à gaz occlus" [16] qui fonctionne sous vide, ce qui présente de nombreux avantages du point de vue de la mise en oeuvre [15]. La géométrie du tube à décharge est coaxiale (Fig. 5) : une cathode annulaire et une anode reposent sur un substrat isolant. Ces deux électrodes sont composées d'hydrure de titane : le titane à la propriété de pouvoir adsorber une grande quantité d'hydrogène, ce qui explique son emploi. Un faisceau d'électrons émis par la cathode chauffe l'anode, ce qui provoque la désorption de l'hydrogène. Sous l'action du faisceau, l'hydrogène désorbé est ionisé; le plasma qui résulte de ce processus est chauffé puis se détend dans le vide. Une électrode d'extraction percée permet d'imposer un champ électrique et de séparer les électrons des ions qui vont former le faisceau. L'intérêt de cette géométrie particulière est d'augmenter l'efficacité de la source : le chauffage de l'anode peut entraîner une émission parasite d'ions titane (jusqu'à 90% de l'ensemble des ions produits). Avec ce dispositif, il est possible de contrôler le chauffage de l'anode de façon à ce que sa température soit supérieur à $500 \,^{\circ}\text{C}$ (température de dissociation de TiH₂) et inférieure à 4000 $^{\circ}\text{C}$ (température de vaporisation du titane), ce qui permet d'avoir un rendement en ions H⁺ proche de 100%. L'écran permet d'occulter le plasma formé au voisinage de la cathode (qui lui est très pollué par les ions titane) afin qu'il ne s'étende pas jusqu'à l'électrode extractrice.

La description de cette source peut être décomposée en plusieurs parties :

• Une description de la décharge très basse pression au voisinage de la cathode. Elle est peu influencée par les phénomènes se produisant près de l'anode, à cause de la géométrie [49].

• La détermination du flux et de l'énergie des électrons issus de la cathode qui se déposent au voisinage de l'anode [7] [34].

• La description du dépôt d'énergie dans l'hydrure de titane. La température de surface de l'anode se stabilise à une valeur suffisante pour permettre l'extraction de l'hydrogène gazeux. L'évaluation de l'énergie nécessaire à la désorption de l'hydrogène permet de déterminer quelle énergie est disponible pour l'ionisation du gaz et le chauffage du plasma.

• La description de l'ionisation de l'hydrogène, de son chauffage et de sa détente. La modélisation de cette détente doit être compatible avec les observations expérimentales concernant le flux d'ions, son spectre énergétique spatial, sa distribution en espèces, la température électronique mesurée près de la surface de l'anode et dans la détente du plasma. Les travaux conduits par le D.P.T.A. se situent à l'heure actuelle sur cette quatrième partie, que nous allons maintenant détailler.

Le courant qui circule de la cathode à l'anode, qualifié dans la suite de courant exté-



FIGURE 5 – Coupe schématique de la source d'ions [15].

rieur, est supposé constant, et de densité donnée. Le milieu à étudier s'étend de l'anode en hydrure de titane à la zone de formation du faisceau d'ions. Il a été schématiquement divisé en cinq zones numérotées de 1 à 5 (Fig. 6), correspondant chacune à des phénomènes physiques différents :

- 1. le solide de titane deutéré, chauffé à une température de surface de 500 °C à 700 °C, lorsqu'un régime d'équilibre s'est établi après un régime transitoire de chauffage allant de 100 ns à 1 μ s. A cette température, les molécules d'hydrogène désorbent du titane.
- 2. la zone d'ionisation et de dissociation de l'hydrogène moléculaire, dues à l'apport d'énergie par le courant de décharge. Les espèces présentes dans cette zone sont des neutres, H₂, H, des ions H₂⁺, H⁺ et des électrons e⁻. En toute rigueur, il faut également évoquer la présence de titane (atomes et ions).
- 3. la zone de chauffage résistif du plasma complètement ionisé, composé de protons H⁺ et d'électrons. La température de cette zone est comprise entre 1,5 eV (1110⁴ K) et plusieurs dizaines d'électronvolts (~ 10⁶ K).
- 4. Une zone d'expansion libre du plasma (H⁺, e⁻) dans le vide, découplée de la décharge.
- 5. Une zone de formation du faisceau de protons déterminée par le champ électrique extérieur.

Seules les trois premières zones sont soumises à l'influence du courant extérieur. L'énergie qu'il transporte sert à désorber l'hydrogène (zone 1), à le ioniser et le dissocier (zone 2), et à chauffer le plasma (zone 3). Une difficulté de ce problème est qu'en parcourant



FIGURE 6 – Découpage schématique du milieu en 5 zones.

les zones 2 et 3 on passe d'un plasma faiblement ionisé et froid à un plasma fortement ionisé et chaud. Dans la suite de ce document, nous ferons référence à cette numérotation des zones.

0.3.3 Etablissement d'un modèle et résolution numérique

Les travaux décrits dans ce document sont consacrés à la modélisation des zones 2, 3 et 4 et à leur résolution numérique. L'étude de la zone 1 est également menée au D.P.T.A. : elle permet de déterminer les conditions limites en amont de la zone 2. La description de la formation du faisceau (5) n'entre pas, à l'heure actuelle, dans le cadre de cette étude. L'utilisation d'outils identiques à ceux qui sont développés dans la première partie de ce document est toutefois envisageable.

A notre connaissance, peu d'études ont été conduites sur des sujets équivalents. La problématique est d'envisager une modélisation suffisamment fine pour rendre compte des nombreux phénomènes physiques intervenant, tout en veillant à ce que les systèmes d'équations obtenus aient autant que possible de bonnes propriétés mathématiques. La méthodologie retenue consiste en une complexification progressive du modèle, avec à chaque étape l'identification des difficultés numériques leur résolution.

La modélisation proposée permet de prendre en compte l'ionisation d'un gaz d'hydrogène sous l'action d'un courant extérieur, le chauffage du plasma ainsi formé et son expansion dans le vide (Chapitre 5). Le plasma considéré est composé de trois espèces de particules (neutres, ions et électrons). La densité du plasma étant suffisamment élevée (de l'ordre de 10²³ particules par mètre cube), nous employons une description hydrodynamique du plasma, permettant de prendre en compte les collisions entre les électrons d'une part et les neutres et les ions d'autre part. Un certain nombre d'hypothèses sur le plasma et le courant extérieur permettent de simplifier l'expression des lois de conservation de la densité, de la quantité de mouvement et de l'énergie pour se ramener à un système à cinq équations. Nous nous intéressons ensuite aux propriétés mathématiques de ce système. En dehors de l'Equilibre Thermodynamique Local (ETL) il est généralement hyperbolique; il peut néanmoins y avoir une perte locale d'hyperbolicité due à des croisements de valeurs propres de natures différentes (Section 5.2.2). Le système est alors dit *résonnant*. Si on suppose par contre que l'ETL est atteint, il peut y avoir des valeurs propres non réelles, et le système n'est plus hyperbolique. En l'absence de choc, une formulation en entropie permet de l'écrire sous forme conservative (Section 5.2.3). Nous proposons ensuite un modèle plus simple, limité aux zones 3 et 4, de sorte que le plasma est maintenant totalement ionisé (Section 5.3). Des conditions limites sont données à l'interface entre les zones 2 et 3. Ce modèle a les mêmes propriétés mathématiques que le modèle "global", de sorte que sa résolution numérique nécessite des méthodes équivalentes et présente les mêmes difficultés.

La résolution numérique du système issu de ce modèle totalement ionisé est décrite dans le cas monodimensionnel plan en utilisant une approximation par différences finies (Chapitre 6). Le chauffage imposé sur la zone 3 donne un terme source raide dans l'équation de conservation de l'énergie, qui conduit à la formation le long de la frontière (interface entre les zones 2 et 3) d'une couche limite qui nécessite une gestion particulière (Section 6.4). Cela peut être considéré comme une des particularités du problème que nous traitons : dans d'autres situations, comme par exemple un dépôt d'énergie par laser, les phénomènes de conduction thermique sont très important, et il n'existe donc pas de couche limite. L'expansion du plasma dans le vide impose également un traitement adéquat (Section 6.5). Outre ces points particuliers, la principale difficulté réside dans le traitement de l'interface entre les zones 3 et 4, qui sépare une zone où le plasma est soumis au courant extérieur et une zone où il n'est plus chauffé.

Des études préliminaires [36] ont permis de montrer que l'utilisation de la méthode des caractéristiques donne rapidement des densités négatives, ce qui amène à utiliser le schéma HLLE, positif. Ce schéma, utilisé tel quel, conduit à l'apparition de points résonnants, et donc à une perte d'hyperbolicité du système, et donne des solutions non physiques (Section 6.6.2). Pour résoudre ce problème, nous avons développé une méthode qui repose sur la résolution couplée de deux systèmes qui différent par leur fonction flux. Le couplage des deux schémas correspondants a lieu sur l'interface qui sépare les zones 3 et 4 (Section 6.7). Cette technique, pour laquelle il est possible de vérifier certaines propriétés théoriques (voir également Annexe C) prévient l'apparition des résonnances, et permet donc d'obtenir des solutions en accord avec l'intuition physique.

Remarque. Les deux parties qui composent ce document semblent a priori différentes l'une de l'autre, tant par les dispositifs étudiés que par les modélisations et les méthodes de résolution numérique employées. Dans la première partie, nous proposons un modèle d'extraction fondé sur la définition d'une surface émissive artificielle dans le plasma. Un modèle cinétique est résolu à l'aide de méthodes particulaires qui conduisent à l'élaboration d'un code PIC. Dans la deuxième partie, nous modélisons explicitement un plasma créé au voisinage d'une électrode à l'aide d'un modèle hydrodynamique, et nous utilisons des méthodes adaptées à la résolution de systèmes hyperboliques de lois de conservation. En fait, nous verrons que les deux parties se rejoignent dans leurs perspectives : nous envisageons d'utiliser un modèle hydrodynamique dans la chambre à plasma du dispositif étudié dans la première partie, et un modèle cinétique pour décrire l'extraction du faisceau en aval du plasma d'anode de la deuxième partie.

Première partie Extraction d'un faisceau d'ions

Notations employées dans la première partie

Les unités utilisées sont celles du Système International, a l'exception de l'énergie, exprimée en électronvolts; par extension, la température est également exprimée en électronvolts, en rappelant la conversion d'unité : $T [eV] = \frac{e}{k}T[K] = 11605 T [K]$.

Constantes physiques

- e : charge de l'électron
- k : constante de Boltzmann

 m_i : masse du proton

 m_e : masse de l'électron

Symboles

E : champ électrique

 Φ : potentiel électrique

 λ_D : longueur de Debye

f: fonction de distribution ionique

 $n \ ({\rm ou} \ \rho), j, k$: densité, densité de courant et densité d'énergie particulaires associées aux ions

 n_0 : densité constante du plasma neutre au repos

s: taux d'ionisation

 ν : fréquence de collisions électrons-neutres

 c_s : vitesse acoustique ionique

 ε : paramètre caractéristique du plasma

 γ : paramètre caractéristique de l'ionisation

 Φ_a : potentiel solution de l'approximation quasi-neutre

 a_{γ} : limite de validité de l'approximation quasi-neutre

D: fonction de Dawson

 χ : fonction test

Chapitre 1

Modélisation de la source

1.1 Introduction

Dans ce chapitre, les caractéristiques typiques des installations que nous souhaitons décrire nous permettent de faire un certain nombre d'hypothèses générales et d'établir le modèle d'extraction. En l'absence de champ magnétique, les équations de Maxwell se réduisent à l'équation de Poisson sur le potentiel électrique. Nous adoptons une modélisation hydrodynamique des électrons, ce qui nous permet d'exprimer directement la densité électronique en fonction du potentiel, et une description cinétique des ions par l'équation de Vlasov. Celle-ci est enrichie par un modèle d'ionisation collisionnelle. Nous concevons ainsi notre étude comme la recherche d'une solution stationnaire du système de Vlasov-Poisson en temps, qui se révèle fortement non linéaire. Nous définissons ensuite le potentiel plasma, qui nous servira ultérieurement à compléter les conditions aux limites. La définition des grandeurs caractéristiques du problème nous conduit à ramener l'optimisation du dispositif d'extraction à une étude paramétrique du système de Vlasov-Poisson. Nous introduisons enfin le domaine d'étude, sous la forme d'une diode "modèle", de façon à préciser les conditions aux limites.

1.2 Construction du modèle d'extraction

Le plasma est composé de trois espèces de particules : des ions H^+ de charge +e, des électrons de charge -e et des molécules d'hydrogène H_2 . Nous nous limitons pour simplifier à une seule espèce d'ions ; pour la description d'un modèle multi-espèces, on renvoie le lecteur à [10]. Les ions sont produits par des collisions ionisantes entre les électrons (électrons primaires de la décharge, électrons secondaires du plasma) et les neutres. Ce plasma est soumis à un champ électrique extérieur et on fait les hypothèses générales suivantes :

(i) Les électrons sont à l'équilibre, leur température ${}^1 T_e$ est de l'ordre de 10 eV; les ions sont froids, i.e. $T_i \ll T_e$.

^{1.} On rappelle la formule de conversion d'unité : $T[eV] = \frac{e}{k}T[K] = 11605 T[K]$. Par abus de langage, on parle de *température* en eV, alors qu'il s'agit d'une *énergie*.

- (ii) Le plasma neutre est peu dense, sa densité $n_0 = n_i = n_e$ est comprise entre 10^{16} et 10^{18} particules par mètre cube.
- (iii) Il est faiblement ionisé, c'est-à-dire que le degré d'ionisation vérifie $\frac{n_0}{n_0 + n_n} \ll 1$ où n_n est la densité des molécules d'hydrogène.
- (iv) Il n'y a pas de champ magnétique extérieur, et les courants sont suffisamment faibles pour négliger le champ magnétique propre.
- (v) Les ions sont non collisionnels : on ne prend pas en compte les collisions entre particules chargées.

Par ailleurs, les vitesses des particules sont suffisamment faibles pour pouvoir négliger les effets relativistes.

Nous devons décrire l'évolution du champ électrique et le transport des deux populations de particules chargées soumises à ce champ.

1.2.1 Le champ électrique

Le champ électrique est la somme du champ extérieur imposé et du champ autoconsistant induit par les particules. Le champ magnétique étant nul, E vérifie les équations

$$\begin{cases} \nabla \times E = 0\\ \nabla \cdot E = \frac{e}{\varepsilon_0} (n_i - n_e). \end{cases}$$

De la première équation on déduit que le champ E dérive d'un potentiel Φ , $E = -\nabla \Phi$, et de la deuxième que le potentiel est solution de l'équation de Poisson :

$$\Delta \Phi = -\frac{e}{\varepsilon_0} (n_i - n_e). \tag{1.1}$$

1.2.2 Les électrons

Nous supposons que les électrons sont à l'équilibre, ce qui permet d'adopter une description hydrodynamique; ils ont une masse m_e , se déplacent à la vitesse u_e et sont assimilés à un fluide isotherme de température T_e . La conservation de la quantité de mouvement des électrons s'écrit :

$$m_e \left(\partial_t (n_e u_e) + \nabla (n_e u_e \otimes u_e)\right) + \nabla P_e = -eE = en_e \nabla \Phi \tag{1.2}$$

оù

$$p_e = n_e k T_e \tag{1.3}$$

est la pression électronique, k étant la constante de Boltzmann. Si on néglige l'inertie des électrons devant les forces de pression, l'équation (1.2) devient

$$\nabla P_e = e n_e \nabla \Phi.$$

D'après l'hypothèse de fluide isotherme, (1.3) donne

$$\nabla P_e = kT_e \nabla n_e,$$

de telle sorte que

$$\nabla n_e = \frac{e}{kT_e} n_e \nabla \Phi. \tag{1.4}$$

D'autre part,

 $n_e(0) = n_0,$

et nous avons choisi de prendre

$$\Phi(0) = 0.$$

En intégrant (1.4) entre 0 et x, on obtient la relation de Maxwell-Boltzmann entre la densité électronique et le potentiel :

$$n_e = n_0 \exp\left(\frac{e\Phi}{kT_e}\right). \tag{1.5}$$

Remarque. La comparaison des fréquences de collisions et des temps caractéristiques ne permet pas toujours de justifier la thermalisation des électrons par les collisions entre particules. Toutefois, les expériences réalisées justifient cette hypothèse qui est connue sous le nom de paradoxe de Langmuir [28].■

1.2.3 Les ions

Les ions sont caractérisés par leur fonction de distribution, $f_i(x, v, t)$, définie dans l'espace des phases (x, v) au temps t. Cette fonction vérifie l'équation de Vlasov :

$$\partial_t f_i(x,v,t) + v \nabla_x f_i(x,v,t) - \frac{e}{m_i} \nabla \Phi \nabla_v f_i = s.$$

L'hypothèse fondamentale qui est exprimée par le choix de l'équation de Vlasov est que les particules interagissent entre elles par un effet collectif. Le couplage avec l'équation de Poisson est assuré par le potentiel Φ . Le terme de production s au second membre modélise un processus d'ionisation à partir des collisions entre électrons et neutres. Nous effectuons les hypothèses suivantes :

1- les neutres ont une très faible énergie et n'en communiquent quasiment pas aux ions ce qui permet de considérer que l'ionisation se fait à vitesse nulle.

2- Puisque la chambre à plasma est en permanence alimentée en hydrogène, nous considérons que la densité des neutres est constante : le taux d'ionisation ne dépend que de la densité électronique.

3- On suppose que les électrons libérés par les collisions, plus mobiles que les ions, sont rapidement absorbés par le bord de l'enceinte. Cela permet de négliger les recombinaisons.

Une fois ces hypothèses faites, trois types d'ionisation peuvent être distingués :

• $s = \nu_{en} n_0$: le taux d'ionisation est constant. C'est le cas lorsque l'ionisation est principalement due aux électrons primaires; ces électrons qui proviennent de la décharge sont plus énergétiques, et peu sensibles à la différence de potentiel à travers la gaine, ce qui explique que le taux soit constant. • $s = \nu_{en} n_e$: le taux d'ionisation est proportionnel à la densité électronique : cette situation se produit si les collisions ont majoritairement lieu entre les neutres et les électrons secondaires, ceux du plasma. Même s'il est vrai que l'énergie moyenne des électrons, de l'ordre de 10 eV, est inférieure à l'énergie d'ionisation de l'hydrogène (13, 6 eV), l'ionisation reste possible avec les électrons situés dans la queue de distribution. Leur énergie peut atteindre 50 eV.

• $s = \nu_{en} \frac{n_e^2}{n_0}$: l'ionisation se fait en deux phases : une première collision avec un électron fait passer l'atome dans un état excité; une deuxième collision va produire les particules chargées.

Ces trois situations peuvent être résumées en écrivant de manière générale que le taux d'ionisation est de la forme

$$s(n_e) = \nu_{en} n_0 \left(\frac{n_e}{n_0}\right)^{\gamma} = \nu_{en} n_0 \exp(\gamma \frac{e\Phi}{kT_e}), \quad \gamma = 0, 1 \text{ ou } 2.$$
(1.6)

Comme le taux d'ionisation est proportionnel à $\left(\frac{n_e}{n_0}\right)^{\gamma}$, avec $n_e < n_0$, l'ionisation est d'autant plus faible que γ augmente. D'autre part, puisque les électrons sont confinés dans le plasma neutre et dans la gaine, l'ionisation ne se produit que dans ces deux zones. Nous pouvons calculer une estimation de la fréquence de collision ν_{en} : elle est donnée par

$$\nu_{en} = n_n < \sigma_{ion} v_e >,$$

où σ_{ion} est la section efficace d'ionisation. Nous utilisons l'approximation simple des sphères rigides [21] : on définit le rayon de Bohr de l'atome d'hydrogène,

$$a_0 = h \frac{2\varepsilon_0}{m_e e^2}$$

et on pose

$$\sigma_{ion} \simeq \pi a_0^2$$

Les électrons étant à l'équilibre, on considère que

$$v_e \simeq v_{th} = \sqrt{\frac{kT_e}{m}},$$

si bien que

$$\nu_{ea} \simeq n_n \pi a_0^2 v_{th}.$$

A partir de maintenant, nous notons simplement $\nu = \nu_{en}$ la fréquence de collisions électrons-neutres.

L'équation de Vlasov qui décrit le mouvement des ions s'écrit finalement

$$\partial_t f_i + v \nabla_x f_i - \frac{e}{m_i} \nabla \Phi \nabla_v f_i = s(n_e) \delta(v), \qquad (1.7)$$

la masse de Dirac en v caractérisant l'ionisation à vitesse nulle. Le taux d'ionisation est donné par (1.6). Dans la suite, nous noterons plus simplement f(x, v, t) la fonction de distribution ionique. Les premiers moments de cette fonction de distribution permettent de calculer la densité et le courant particulaires :

$$\begin{cases} n_i(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, v, t) dv \\ j_i(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} v f(x, v, t) dv \end{cases}$$

1.2.4 Définition du problème de Vlasov-Poisson

Il est possible de voir la relation de Maxwell-Boltzmann comme une équation d'état qui donne immédiatement la densité électronique une fois le potentiel connu. Le problème est donc de trouver n_i et Φ solutions des équations (1.1) et (1.7) qui forment le système de Vlasov-Poisson qui s'écrit finalement

$$\begin{cases} \Delta \Phi = -\frac{e}{\varepsilon_0} \left(n_i - n_0 \exp\left(\frac{e\Phi}{kT_e}\right) \right) \\ \partial_t f_i + v \nabla_x f_i - \frac{e}{m_i} \nabla \Phi \nabla_v f_i = s(\Phi) \delta(v) \\ n_i = \int_{-\infty}^{+\infty} f(v) dv. \end{cases}$$

Ce système doit être complété par des conditions aux limites dont la description fait l'objet des Chapitres 1.5 et 2.

C'est un problème fortement non linéaire, pour lequel on décèle plusieurs sources de non-linéarité : le couplage Vlasov-Poisson, qui engendre une non-linéarité quadratique due au terme $\nabla \Phi \nabla_v f$, et la définition du second membre de l'équation de Poisson qui dépend de n_e , donné par (1.5).

1.3 Calcul du potentiel plasma

Nous avons vu dans l'introduction (p. 9) qu'une différence de potentiel s'établit entre le plasma et la paroi qui le confine. L'origine du potentiel ayant été fixée dans le plasma, cette différence est vue comme un potentiel négatif appliqué sur la paroi. Nous l'appelons *potentiel plasma*. Un modèle simple monodimensionnel permet d'établir que, dans le cas d'une gaine anodique, cette différence est définie par :

$$\Phi_c = -\frac{kT_e}{2e} \ln\left(\frac{m_i}{m_e}\right). \tag{1.8}$$

En effet, la neutralité du plasma se traduit par l'égalité des flux ionique et électronique en sortie de plasma, soit

$$n_i v_i = n_e v_e. (1.9)$$

En faisant l'hypothèse des ions froids $(T_i \ll T_e)$, la vitesse des ions est égale à la vitesse acoustique ionique, soit

$$v_i = c_s = \sqrt{\frac{kT_e}{m_i}}.$$

Cela correspond au *critère de Bohm* : la vitesse des ions doit être supérieure ou égale à la vitesse acoustique ionique pour qu'il y ait effectivement la création d'une gaine [13] [18][40].

La vitesse des électrons est quant à elle égale à la vitesse thermique,

$$v_e = \sqrt{\frac{kT_e}{m_e}},$$

si bien que

$$\frac{v_i}{v_e} = \sqrt{\frac{m_e}{m_i}}.$$

D'autre part, la densité électronique vérifiant $n_e = n_0 \exp(\frac{e\Phi_c}{kT_e})$, l'égalité des flux (1.9) s'écrit

$$n_0 v_i = n_0 \exp(\frac{e\Phi_c}{kT_e}) v_e,$$

de telle sorte que

$$\Phi_c = \frac{kT_e}{e} \ln\left(\sqrt{\frac{m_e}{m_i}}\right).$$

Ce résultat nous permet de lier le potentiel plasma à la température électronique.

1.4 Adimensionnement du modèle

Soit \overline{A} la grandeur caractéristique associée à la variable A, et A' vérifiant $A = A'\overline{A}$ la quantité sans dimension associée.

Comme l'objet de l'étude est d'obtenir une description suffisamment précise du plasma émetteur et de la gaine, c'est dans cette zone que doivent être déterminées les dimensions caractéristiques.

Nous prenons comme potentiel caractéristique

$$\bar{\Phi} = -\frac{kT_e}{e},$$

qui est du même ordre de grandeur² que le potentiel plasma donné par (1.8). Remarquons que, $\overline{\Phi}$ étant négatif, les ions se dirigent maintenant dans le sens des potentiels (adimensionnés) croissants.

Dans une gaine, la vitesse caractéristique est donnée par la vitesse acoustique ionique,

$$\bar{v} = c_s = \sqrt{\frac{kT_e}{m_i}}$$

La densité caractéristique est la densité au centre du plasma, soit

2. Pour un plasma d'hydrogène,
$$\ln\left(\sqrt{\frac{m_e}{m_i}}\right) \simeq 3,7$$

et on pose

Il reste à définir la longueur caractéristique \bar{x} . Elle est classiquement donnée par la dimension du domaine [5][40]. Or, du fait de la stratégie que nous avons employée, nous ne connaissons pas la taille du domaine : elle dépend de la position d'une frontière artificielle dont les caractéristiques seront précisées dans le chapitre suivant. Nous verrons alors (p. 38) qu'on est amené à prendre comme longueur caractéristique

 $\bar{f} = \frac{\bar{n}}{\bar{v}}.$

$$\bar{x} = \frac{1}{\nu} \sqrt{\frac{2kT_e}{m_i}} = \frac{\sqrt{2}v_s}{\nu}.$$

Cette quantité est de l'ordre de grandeur de la distance moyenne parcourue par un *ion* entre deux collisions ionisantes *électron-neutre*. On en déduit

$$\bar{t} = \frac{\bar{x}}{\bar{v}}.$$

Le système de Vlasov-Poisson s'écrit donc

$$\begin{cases} \frac{\bar{n}}{\bar{x}} \left(\partial_{t'} f' + v' \nabla_{x'} f' + \nabla \Phi' \nabla_{v'} f'\right) = \frac{\nu \bar{n}}{\bar{v}} e^{-\gamma \Phi'} \delta(v) \\ -\frac{\varepsilon_0 \bar{\Phi}}{e \bar{x}^2} \Delta' \Phi' = \bar{n} \left(n'_i - n'_e\right). \end{cases}$$

On introduit la longueur de Debye électronique³ au centre du plasma, donnée par

$$\lambda_D = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k T_e}{n_0 e^2}},$$

et le paramètre

$$\varepsilon = \frac{\lambda_D}{\bar{x}}$$

qui représente donc la longueur de Debye adimensionnée.

On peut en outre poser

$$\bar{s} = \frac{\nu \bar{n}}{\sqrt{2}}$$

et écrire que $s(n_e) = \bar{s}s'(n'_e)$ avec le taux d'ionisation adimensionné $s'(n'_e) = \sqrt{2}e^{-\gamma\Phi}$.

En enlevant les "′" pour plus de lisibilité, on écrit les équivalents adimensionnés de l'équation de Poisson (1.1)

$$\varepsilon^2 \Delta \Phi = n_i(\Phi) - n_e(\Phi), \qquad (1.10)$$

^{3.} Cette quantité représente la distance d'internaction entre particules dans un plasma. Pour les plasmas étudiés ici, elle est de l'ordre de 10^{-5} , 10^{-4} mètres.

de la relation de Maxwell-Boltzmann (1.5)

$$n_e(\Phi) = e^{-\Phi},\tag{1.11}$$

et de l'équation de Vlasov (1.7)

$$\partial_t f + v \nabla_x f + \nabla \Phi \nabla_v f = s(n_e) \delta(v).$$

Dans la suite, si rien n'est précisé, nous n'utiliserons que des grandeurs adimensionnées. Si on a besoin ponctuellement des grandeurs physiques, on les notera A_{dim} .

Observons que le paramètre ε défini par

$$\varepsilon = \frac{\lambda_D}{\bar{x}} = \sqrt{\frac{m_i \varepsilon_0}{2e^2}} \frac{\nu(n_n, T_e)}{\sqrt{n_0}}:$$

dépend de la densité des neutres, de celle des particules chargées, et de la température électronique. Ce sont les grandeurs qui caractérisent le plasma. Le résultat des simulations en fonction des variations de ce paramètre doit donc permettre de définir des valeurs relatives de ces grandeurs pour lesquelles la source fonctionne de manière optimale. Un second paramètre, γ , permet en outre d'envisager de façon simple différents types d'ionisation.

1.5 Définition du domaine d'étude

Le dispositif simplifié que nous considérons est une diode (Fig. 1.1), formée de deux électrodes planes, l'une munie d'un orifice, appelée électrode plasma, et l'autre pleine et infiniment mince, qualifiée d'électrode extractrice. Cette diode est supposée infinie dans la direction transverse, et elle est symétrique par rapport à l'axe (0, x). Elle n'est pas explicitement bornée en amont de l'électrode plasma, là où se trouve le plasma émetteur, homogène, au repos. Des potentiels négatifs sont appliqués sur les électrodes. Nous supposons que le champ électrique est uniquement longitudinal si on est suffisamment éloigné de l'électrode trouée, de sorte que les équipotentielles sont parallèles au plan des électrodes (Fig. 1.1).

Il faut maintenant définir un domaine borné (Fig. 1.2) pour la résolution numérique. Il est donc nécessaire de se donner des frontières artificielles pour le fermer dans la direction transverse et dans la direction longitudinale au sein du plasma neutre. Nous appelons ce domaine Ω et sa frontière $\Gamma = \Gamma_d \cup \Gamma_n \cup \Gamma_s \cup \Gamma_i$. Notons de manière générique $\vec{\nu}_{\alpha}$ la normale extérieure à Γ_{α} .

Il s'agit maintenant de caractériser les frontières Γ_{α} , et notamment de préciser la valeur du potentiel Φ et de la fonction de distribution ionique f sur Γ . Il convient de distinguer les frontières physiques des frontières artificielles.

• La frontière Γ_d correspond au bord de l'électrode plasma; le potentiel est imposé (condition de Dirichlet), et les ions sont absorbés :



FIGURE 1.1 – Schématisation de la diode d'extraction et hypothèses sur les lignes de potentiels.



FIGURE 1.2 – Définition des frontières.
$$\begin{cases} \Phi|_{\Gamma_d} = \Phi_d \\ f|_{\Gamma_d}(x, v) = 0 \text{ pour } v.\vec{\nu_d} < 0. \end{cases}$$

• La frontière aval Γ_s est l'électrode de sortie. Sur cette frontière purement absorbante qui ferme le domaine, les conditions sont les mêmes que sur Γ_d (potentiel imposé, pas de réémission d'ions). Dans le cas où une électrode trouée est placée en sortie, nous serons amenés à proposer une autre caractérisation de Γ_s (cf. Section 4.4.4).

• La frontière Γ_n est une première frontière artificielle. En considérant qu'elle est suffisamment éloignée de l'axe de symétrie de la diode, nous pouvons dire que la composante transverse du champ y est nulle. Cela revient à imposer une condition de type Neumann sur le potentiel,

$$\nabla \Phi . \vec{\nu_n} |_{\Gamma_n} = 0.$$

Les particules ont donc un comportement monodimensionnel dans la direction longitudinale, ce que l'on traduit par une condition de réflexion sur Γ_n :

$$f|_{\Gamma n}(x,v;(v.\vec{\nu}_n < 0)) = f|_{\Gamma n}(x,v;(v.\vec{\nu}_n > 0)).$$

Au cours des simulations que nous avons effectuées, nous avons vérifié que cette condition était la bonne en constatant qu'il n'y avait pas de particules qui franchissaient Γ_n .

• Nous achevons la caractérisation de Γ en définissant une deuxième frontière artificielle, Γ_i . C'est une frontière purement émettrice, si bien que

$$f|_{\Gamma_i}(x,v) = 0$$
 pour $(v.\vec{\nu}_i) > 0.$

L'émission est caractérisée par

$$f|_{\Gamma_i}(x,v) = f_i \text{ pour } (v.\vec{\nu}_i) < 0,$$

et le potentiel est

$$\Phi|_{\Gamma_i} = \Phi_i.$$

La détermination des valeurs de Φ_i et f_i est l'objet du chapitre suivant. Pour cela, nous supposons que la frontière d'injection est située dans une zone où la composante transverse du champ est nulle. Le comportement du plasma est donc monodimensionnel, dans la direction longitudinale.

Lors de la résolution numérique sur des dispositifs axisymétriques en coordonnées cylindriques, nous aurons à caractériser une troisième frontière artificielle correspondant à l'axe de symétrie du dispositif (Chapitre 3.8).

Remarque. Les dispositifs réels comportent plusieurs électrodes trouées. Cela revient simplement à multiplier les frontières de type Γ_d et Γ_n .

Chapitre 2

Etude monodimensionnelle : détermination des conditions limites sur Γ_i

2.1 Introduction

Le but de ce chapitre est de déterminer le potentiel Φ_i et la fonction de distribution f_i sur la frontière émettrice Γ_i , définie dans le chapitre précédent. Nous commençons par établir un modèle simplifié sur un domaine monodimensionnel permettant d'étudier le comportement d'un plasma soumis à un champ électrique. Ce modèle est en fait très voisin de celui que nous avons défini dans le chapitre précédent. Dans le cadre de ce modèle, nous dérivons ensuite le problème de Vlasov-Poisson présenté dans la Section 1.2.4. Nous le réduisons à un problème de Poisson non linéaire, qui s'exprime sous la forme d'une équation intégro-différentielle sur le potentiel (Section 2.3). La résolution numérique de cette équation donne le profil du potentiel et de la densité dans le domaine monodimensionnel. Nous regardons alors l'effet des variations des paramètres ε et γ sur les tailles respectives de la zone neutre et de la gaine.

Dans la Section 2.4, nous faisons une hypothèse supplémentaire de quasi-neutralité du plasma. Nous précisons les bornes du domaine sur lequel cette approximation est valable, et nous comparons les valeurs analytiques obtenues aux résultats numériques de la Section 2.3. Nous pouvons alors calculer une expression analytique de la fonction de distribution ionique solution de l'équation de Vlasov, f_p . Nous complétons cette section par la définition et l'étude de l'approximation de gaine qui, si elle n'est pas nécessaire à l'obtention des conditions limites sur Γ_i , nous procure une validation supplémentaire de nos travaux.

La Section 2.5 est consacrée à la détermination proprement dite des conditions limites sur Γ_i . Puisque nous avons supposé que le comportement du plasma était monodimensionnel en Γ_i , nous pourrons utiliser les résultats obtenus jusqu'alors dans ce chapitre. La Section 2.3 permet de calculer la valeur de Φ_i . Nous nous servons ensuite de l'expression analytique de la fonction de distribution f_p pour calculer $f_i = f_p(\Phi_i)$.

2.2 Réduction à un domaine monodimensionnel plan

Nous considérons maintenant un modèle élémentaire proposé par Langmuir : un plasma homogène est contenu entre deux électrodes planes, reliées à la masse. Elles sont séparées par une distance $2L_c$ suivant x, et infini dans la direction perpendiculaire. Le plasma est injecté entre les deux électrodes, ce qui conduit à la formation d'une gaine anodique entre le plasma neutre et les électrodes, et donc d'une différence de potentiel (cf. Section 1.3). Le potentiel étant défini à une constante près, nous choisissons ici aussi de le prendre égal à 0 au centre du plasma, ce qui revient à appliquer un potentiel négatif, noté $-\Phi_c$, sur les deux électrodes (Fig; 2.1).



FIGURE 2.1 – Modèle simplifié de Langmuir.

Le plasma étant homogène, la symétrie du domaine de part et d'autre d'un axe vertical passant par x = 0 implique une symétrie du plasma : il y a autant d'ions qui traversent cet axe de droite à gauche qu'en sens inverse, et avec les mêmes caractéristiques. Cette symétrie et l'absence de champ électrique radial permettent de se restreindre pour la suite à une étude monodimensionnelle sur le domaine $\Omega_{1D} = [0, L_c]$.

Les conditions aux limites de ce domaine sur le potentiel sont donc

$$\begin{cases} \Phi(0) = 0\\ \Phi(L_c) = -\Phi_c. \end{cases}$$
(2.1)

Elles sont complétées par une condition sur la dérivée du potentiel, due à la symétrie en 0 :

$$\frac{d\Phi}{dx}(0) = 0. \tag{2.2}$$

Dans le problème traité par Langmuir, le potentiel de l'électrode n'est pas connu; dans notre modèle d'extraction, la taille du domaine L_c est une inconnue : dans les deux cas, la caractérisation du potentiel à la fois par les conditions (2.1) et par cette condition sur sa dérivée à l'origine n'introduit pas de conditions surabondantes.

Nous supposons qu'il n'y a pas d'ion piégé, et donc que le potentiel est monotone décroissant entre 0 et L_c .

Les conditions limites sur la fonction de distribution s'écrivent

$$\begin{cases} f(0, v > 0) = 0\\ f(L_c, v < 0) = 0. \end{cases}$$
(2.3)

La condition en 0 vient de la symétrie du plasma, qui donne

$$f(x = 0, v > 0) = f(x = 0, v < 0).$$

La condition en L_c suppose qu'il n'y pas réflexion des ions à partir de la cathode, ce qui est consistant avec les hypothèses faites quant à la monotonie du potentiel. En conséquence, on considère que les ions présents sur $[0, L_c]$ sont uniquement ceux qui ont été créés par ionisation.

A l'instar de ce qui est fait dans l'étude bidimensionnelle (Introduction générale, Section 0.2.2), nous décomposons le domaine Ω_{1D} en deux sous-domaines : plasma neutre $(n_i = n_e)$ et gaine $(n_i > n_e)$.

Remarque. Comparaison entre le modèle de Langmuir et le modèle d'extraction.

Nous avons supposé dans la définition de la diode d'extraction que le champ électrique transverse est nul à une certaine distance de l'électrode plasma. Cela revient à dire que le plasma se comporte dans cette zone comme s'il "voyait" une électrode plane. Nous pouvons donc considérer qu'il existe un voisinage du centre du plasma dans lequel le modèle de Langmuir est une approximation acceptable du modèle d'extraction. Cet argument nous permettra d'utiliser les résultats obtenus dans le cadre du modèle de Langmuir pour déterminer les conditions limites dans le modèle d'extraction.

2.3 Détermination des conditions aux limites sur le potentiel

Dans cette section, nous montrons que, dans le cas monodimensionnel plan, résoudre le problème de Vlasov-Poisson revient à trouver Φ solution d'une équation différentielle du premier ordre, complétée par des conditions initiales (en x = 0). Rappelons que nous cherchons un potentiel strictement monotone. Cela revient à trouver le profil du potentiel entre le "centre du plasma" et la paroi de la chambre.

2.3.1 Réduction à un problème de Poisson non linéaire

Nous revenons aux variables physiques (non adimensionnées). Les conditions limites sur le potentiel sont données par (2.1) et (2.2) et sur la distribution ionique par (2.3).

Soit (Φ, n_i) la solution du problème de Vlasov-Poisson monodimensionnel : le potentiel et la densité ionique vérifient en premier lieu l'équation de Poisson

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} = -\frac{e}{\varepsilon_0}(n_i - n_e).$$
(2.4)

La densité électronique n_e est donnée par la relation de Maxwell-Boltzmann (1.5). Il reste à exprimer la densité ionique.

Rappelons que le taux d'ionisation s'écrit (Section 1.2.3)

$$s(x) = \nu n_0 \exp(\gamma \frac{e\Phi(x)}{kT_e})$$

et nous le noterons également $s(n_e)$ ou $s(\Phi)$, car Φ est une fonction monotone de x et n_e une fonction monotone de Φ . L'équation de Vlasov stationnaire monodimensionnelle s'écrit

$$v\frac{\partial f(x,v)}{\partial x} - \frac{e}{m_i}\frac{d\Phi(x)}{dx}\frac{\partial f(x,v)}{\partial v} = s(x)\delta(v), \qquad (2.5)$$

On peut alors démontrer le lemme suivant :

Lemme 1

Si le potentiel est monotone décroissant sur Ω_{1D} et si f est solution de l'équation de Vlasov (2.5) munie des conditions limites (2.3), alors f s'écrit :

$$f(x,v) = \int_0^x \frac{s(y)}{v(y,x)} \delta(v - v(y,x)) dy,$$
 (2.6)

оù

$$v(y,x) = \sqrt{\frac{2e}{m_i}(\Phi(y) - \Phi(x))}.$$
 (2.7)

Avant de vérifier ce lemme, rappelons la définition suivante :

Definition 2

On dit que f est solution mesure de (2.5) si pour toute fonction $\chi = \chi(x, v) C^1$ à support compact ($\chi \in C_0^1([0, L_c] \times \mathbb{R})$), telle que $\chi(0, v) = 0, v < 0$ et $\chi(L_c, v) = 0, v > 0$, on a

$$-\int_{0}^{L_{c}}\int_{-\infty}^{+\infty}f\left(v\frac{\partial\chi}{\partial x}-\frac{e}{m_{i}}\frac{d\Phi}{\partial x}\frac{\partial\chi}{\partial v}\right)dxdv=\int_{0}^{L_{c}}\int_{-\infty}^{+\infty}s(x)\delta(v)\chi dxdv.$$

Les $\int d\acute{e}signent ici la dualit\acute{e} < mesures, fonctions continues > .$

Preuve du Lemme 1. La démonstration consiste à établir que f définie par (2.6) est solution mesure de l'équation de Vlasov (2.5).

En remplaçant f par sa valeur tirée de (2.6), nous devons donc montrer que

$$-\int_{0}^{L_{c}}\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\int_{0}^{x} \frac{s(y)}{v(y,x)} \delta(w-v(y,x)) dy\right) \left(w \frac{\partial \chi}{\partial x} - \frac{e}{m_{i}} \frac{d\Phi}{\partial x} \frac{\partial \chi}{\partial w}\right) dx dw = \\ = \int_{0}^{L_{c}}\int_{-\infty}^{+\infty} s(x) \delta(w) \chi dx dw.$$

Puisque

$$\int_0^{L_c} \left(\int_0^x dy \right) dx = \int_0^{L_c} \left(\int_y^{L_c} dx \right) dy,$$

cela revient à établir que

$$-\int_{0}^{L_{c}}\int_{y}^{L_{c}}\frac{s(y)}{v(y,x)}\left(v(y,x)\frac{\partial\chi}{\partial x}(x,v(y,x))-\frac{e}{m_{i}}\frac{d\Phi}{\partial x}\frac{\partial\chi}{\partial v}(x,v(y,x))\right)dxdy = \int_{0}^{L_{c}}s(x)\chi(x,0)dx$$
(2.8)

En vertu de l'expression (2.7), on a

$$\frac{\partial v(y,x)}{\partial x} = -\frac{e}{m_i} \frac{1}{v(y,x)} \frac{d\Phi}{dx}(x)$$

et donc, en notant v = v(y, x),

$$\frac{d}{dx}\chi(x,v) = \frac{\partial\chi}{\partial x}(x,v) + \frac{\partial\chi}{\partial v}(x,v)\frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial\chi}{\partial x}(x,v) - \frac{e}{m_i}\frac{\partial\chi}{\partial v}(x,v)\frac{1}{v}\frac{d\Phi}{dx}(x).$$

Par conséquent,

$$\begin{split} &\int_{0}^{L_{c}} \int_{y}^{L_{c}} \frac{s(y)}{v} \left(v \frac{\partial \chi}{\partial x}(x,v) - \frac{e}{m_{i}} \frac{d\Phi}{\partial x} \frac{\partial \chi}{\partial v}(x,v) \right) dx dy = \\ &= \int_{0}^{L_{c}} \int_{y}^{L_{c}} \frac{s(y)}{v} \left(v \frac{\partial \chi}{\partial x}(x,v) + v \left(\frac{d}{dx} \chi(x,v) - \frac{\partial \chi}{\partial x}(x,v) \right) \right) dx dy = \\ &= \int_{0}^{L_{c}} \int_{y}^{L_{c}} s(y) \left(\frac{d}{dx} \chi(x,v) \right) dx dy = \\ &= \int_{0}^{L_{c}} s(y) \left(\chi(L_{c},v(y,L_{c}) - \chi(y,v(y,y)) \right) dy. \end{split}$$

Or, puisque d'une part $\chi \in C_0^1([0, L_c[\times \mathbb{R})])$ et donc $\chi(L_c, v(y, L_c)) = 0$, et que d'autre part v(y, y) = 0, il en découle que

$$-\int_{0}^{L_{c}}\int_{y}^{L_{c}}\frac{s(y)}{v}\left(v\frac{\partial\chi}{\partial x}(x,v)-\frac{e}{m_{i}}\frac{d\Phi}{\partial x}\frac{\partial\chi}{\partial v}(x,v)\right)dxdy=\int_{0}^{L_{c}}s(y)\chi(y,0)dy.$$

Nous avons bien démontré l'égalité (2.8), ce qui achève la démonstration.■

Remarque. L'expression (2.6) de f revient à dire que la distribution ionique en x dépend uniquement des particules créées en tout y compris entre 0 et x au taux s(y). C'est vrai puisqu'il n'y a ni injection de particules en 0 ni réémission en L_c .

D'autre part, v(y, x) est la vitesse d'une particule créée en y quand elle arrive en x. La conservation de l'énergie entre y et x s'écrit

$$\frac{1}{2}m_i v^2(y,y) + e\Phi(y) = \frac{1}{2}m_i v^2(y,x) + e\Phi(x).$$

L'ionisation se faisant à vitesse nulle, v(y, y) = 0 et v(y, x) est alors donnée par (2.7).

Enfin, la stricte décroissance de Φ donne un sens aux expressions (2.6) et (2.7) en tout y.

L'intégration de f par rapport à v permet maintenant de donner une expression de la densité ionique sur Ω_{1D} en fonction du potentiel :

$$n_i(x) = \int_0^x \frac{s(y)}{\sqrt{\frac{2e}{m_i}(\Phi(y) - \Phi(x))}} dy.$$
 (2.9)

Trouver Φ et n_i solution du système de Vlasov-Poisson (2.4)-(2.5) est donc équivalent à chercher Φ solution de l'équation intégro-différentielle

$$\frac{d^2\Phi}{dx^2} + \frac{e}{\varepsilon_0} \left(\int_0^x \frac{\nu n_0 exp(-\gamma \frac{e\Phi(y)}{kT_e})}{\sqrt{\frac{2e}{m_i}(\Phi(y) - \Phi(x))}} dy - n_0 exp(\frac{e\Phi(x)}{kT_e}) \right) = 0, \qquad (2.10)$$

obtenue en remplaçant dans (2.4) n_i par sa valeur tirée de (2.9). En utilisant l'adimensionnement défini dans la Section 1.4 et en multipliant (2.10) par $\frac{\varepsilon_0}{n_0 e}$, on obtient

$$\left(\frac{\lambda_D}{\bar{x}}\right)^2 \frac{d^2 \Phi'}{dx'^2} - \bar{x} \sqrt{\frac{e}{kT_e}} \left(\int_0^{x'} \frac{e^{-\gamma \Phi'(y')}}{\sqrt{\frac{2e}{m_i}(\Phi'(x') - \Phi'(y'))}} dy \right) + e^{-\Phi'(x')} = 0.$$

En choisissant comme distance caractéristique

$$\bar{x} = \frac{1}{\nu} \sqrt{\frac{2kT_e}{m_i}},$$

la forme adimensionnée de (2.10) est

$$\varepsilon^2 \frac{d^2 \Phi}{dx^2} + e^{-\Phi} - \int_0^x \frac{e^{-\gamma \Phi(y)}}{\sqrt{\Phi(x) - \Phi(y)}} dy = 0.$$
 (2.11)

Rappelons que le potentiel adimensionné est positif et croissant sur Ω_{1D} , entre 0 et Φ_c , contrairement au potentiel physique qui est négatif et décroissant.

On peut trouver une intégrale première de l'équation (2.11) : en la multipliant par $\frac{d\Phi}{dx}$ et en intégrant sur[0, x], on se ramène à l'équation intégro-différentielle du premier ordre

$$\frac{\varepsilon^2}{2} \left(\frac{d\Phi}{dx}\right)^2 - 2\int_0^x e^{-\gamma\Phi(y)}\sqrt{\Phi(x) - \Phi(y)} dy + 1 - e^{-\Phi} = 0, \qquad (2.12)$$

autrement dit

$$\frac{d\Phi}{dx} = \sqrt{\frac{2}{\varepsilon}V(\Phi)},$$

en posant

$$V(\Phi) = 2\int_0^x e^{-\gamma\Phi(y)}\sqrt{\Phi(x) - \Phi(y)}dy + e^{-\Phi} - 1.$$
 (2.13)

La solution Φ doit en outre vérifier la condition initiale

$$\Phi(0) = 0. \tag{2.14}$$

Il y a une singularité à l'origine, puisque $\frac{d\Phi}{dx}(0) = 0$ et $V(\Phi(0)) = V(0) = 0$: $\Phi = 0$ est clairement solution de ce problème. Il est possible d'énoncer le théorème suivant, dont la démonstration est technique [38] :

Théorème 3

Pour tout $\varepsilon > 0$, l'équation (2.12) munie des conditions initiales (2.14) possède une solution strictement croissante définie sur $[0, +\infty]$.

La détermination numérique de cette solution fait l'objet du chapitre suivant.

2.3.2 Résolution numérique de l'équation différentielle

Pour résoudre l'équation intégro-différentielle (2.12), on se fixe un pas d'espace Δx , et on note $x_j = j\Delta x$, et $\Phi_j = \Phi(x_j)$ avec $\Phi_0 = 0$. On pose également

$$V_0(\Phi) = 0$$

 et

$$V_j(\Phi) = \Delta x \sum_{k=0}^{j-1} \left(e^{-\gamma \Phi_k} \sqrt{\Phi_j - \Phi_k} + e^{-\gamma \Phi_{j+1}} \sqrt{\Phi_j - \Phi_{k+1}} \right) + e^{-\Phi_j} - 1 \text{ pour } j > 0.$$

Cette approximation de (2.13) est obtenue au moyen de la formule des trapèzes. L'équation (2.12) est alors discrétisée par une méthode d'Euler explicite,

$$\Phi_{j+1} = \Phi_j + \frac{\sqrt{2}\Delta x}{\varepsilon} \sqrt{V_j(\Phi)}.$$
(2.15)

Traitement de l'indétermination à l'origine

Sans traitement particulier, on ne peut trouver ainsi que la solution identiquement nulle; le lemme suivant permet de calculer la solution non triviale.

Lemme 4

La solution non nulle de (2.12) admet le développement $\Phi(x) \simeq \alpha_2 x^2 + o(x^3)$, où α_2 peut être calculé analytiquement en fonction de ε :

$$\alpha_2 = \left(\sqrt[3]{-\frac{q}{2} + D} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - D}\right)^2$$

avec $p = \frac{1}{2\varepsilon^2}$, $q = -\frac{\pi}{4\varepsilon^2}$ et $D = \sqrt{\left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2}$.

Preuve. Un développement polynomial de Φ en 0 permet d'écrire

$$\Phi(x) = \sum_{j=0}^{N} \alpha_j x^j + o(x^{N+1}),$$

avec $\alpha_0 = 0$ et $\alpha_1 = 0$ en vertu des conditions initiales (2.14). Un développement au troisième ordre au voisinage de 0 donne donc

$$\Phi(x) \simeq \alpha_2 x^2 + o(x^3).$$

Puisque Φ est solution de (2.12), on a

$$\frac{\varepsilon^2}{2}(2\alpha_2 x)^2 - 2\int_0^x e^{-\gamma\alpha_2 x^2} \sqrt{\alpha_2 x^2 - \alpha_2 y^2} dy + 1 - e^{-\alpha_2 x^2} = 0.$$
(2.16)

En développant l'exponentielle au voisinage de x = 0, l'intégrale s'écrit

$$\int_0^x e^{-\gamma \alpha_2 x^2} \sqrt{\alpha_2 x^2 - \alpha_2 y^2} dy = \int_0^x \sqrt{\alpha_2 x^2 - \alpha_2 y^2} dy - \gamma \alpha_2 x^2 \int_0^x \sqrt{\alpha_2 x^2 - \alpha_2 y^2} dy \\ = \frac{\pi}{4} \sqrt{\alpha_2 x^2 + o(x^3)},$$

si bien que l'équation (2.16) est équivalente à

$$2\varepsilon^{2}(\alpha_{2}x)^{2} - \frac{\pi}{2}\sqrt{\alpha_{2}}x^{2} + \alpha_{2}x^{2} + o(x^{3}) = 0$$

que l'on écrit, en négligeant les termes d'ordres élevés,

$$x^{2}(2\varepsilon^{2}X^{4} + X^{2} - \frac{\pi}{2}X) = 0$$
, en posant $X = \sqrt{\alpha_{2}}$.

Cette équation est bien vérifiée par $\alpha_2 = 0$, ce qui correspond à la solution triviale $\Phi = 0$. Pour obtenir les autres solutions, nous sommes amenés à résoudre le polynôme de degré 3,

$$2\varepsilon^2 X^3 + X - \frac{\pi}{2} = 0,$$

ou

$$X^3 + pX + q = 0$$

avec

$$p = \frac{1}{2\varepsilon^2}$$
 et $q = -\frac{\pi}{4\varepsilon^2}$.

Ce polynôme a comme unique solution réelle

$$X_1 = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + D} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - D}$$

avec $D = \sqrt{\left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2}$. Outre $\alpha_2 = 0$, (2.16) admet donc $\alpha_2 = X_1^2$ comme solution de (2.16) au voisinage de $0.\blacksquare$

Remarque. Un développement limité de X_1 au voisinage de 0 permet de calculer

$$X_1 = \frac{\pi}{2} + o(\varepsilon),$$

de sorte que

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \alpha_2 = \frac{\pi^2}{4}.$$

Il est maintenant possible d'initialiser la relation (2.15) en prenant

$$\begin{cases} \Phi_0 = 0\\ \Phi_j = \alpha_2 j^2 \Delta x^2 \text{ pour } j < j_0. \end{cases}$$

En théorie, il n'est nécessaire d'utiliser cette approximation que pour le calcul de Φ_1 . Toutefois, $V_j(\Phi) = \Delta x (\sum ...) + (e^{-\Phi_j} - 1)$ est la somme de deux termes de signes contraires et est très proche de 0 au voisinage de l'origine. Dans la pratique, $V_j(\Phi)$ a tendance à devenir négatif du fait de l'imprécision des calculs numériques (et on a besoin de $\sqrt{V_j(\Phi)}$!).

Il faut donc poursuivre l'approximation sur un certain nombre de pas d'espace, que nous notons j_0 ; il est nécessaire de prendre un j_0 d'autant plus grand que ε est petit. Néanmoins, il ne semble pas possible d'établir un critère absolu permettant de déterminer j_0 en fonction de ε . D'autre part, l'approximation $\Phi(x_j) \simeq \alpha_2 j^2 \Delta x^2$ n'est valable que tant que $j_0 \Delta x$ reste proche de 0, ce qui oblige à diminuer le pas d'espace quand ε décroît. Nous avons retenu le choix $\Delta x = \varepsilon^2$ qui paraît être le plus approprié pour des valeurs de ε supérieures à 10^{-3} .

Pour des valeurs plus petites, cette méthode ne permet plus de résoudre numériquement l'équation différentielle (2.12). Une autre technique, plus adaptée à cette situation, sera proposée dans la Section 2.4.2 à la suite de l'étude d'un modèle quasi-neutre.

Calcul de la solution

La longueur L_c de Ω_{1D} n'est pas connue, puisque l'origine du repère que nous utilisons, le "centre du plasma", n'a pas de signification précise. Par contre, les conditions limites (2.1) donnent

$$\Phi(L_c) = \Phi_c.$$

En utilisant la relation (2.15), on calcule la solution non nulle de l'équation intégrodifférentielle (2.12), notée Φ_{CI} , jusqu'à ce que $\Phi_{j+1} > \Phi_c$. On en déduit par interpolation la longueur L_c du domaine, telle que $\Phi_{CI}(L_c) = \Phi_c$. Nous avons ainsi déterminé le potentiel solution de Vlasov-Poisson sur Ω_{1D} (Fig. 2.10, page 59).

Par ailleurs, une fois connu le profil du potentiel sur Ω_{1D} , l'équation de Boltzmann (1.11) et l'équation de Poisson (1.10) discrétisée permettent de calculer les densités électronique et ionique entre 0 et L_c :

$$n_{e}(j\Delta x) = e^{-\Phi_{j}}, n_{i}(j\Delta x) = \varepsilon^{2} \frac{\Phi_{j+1} - 2\Phi_{j} + \Phi_{j-1}}{\Delta x^{2}} + n_{e}(j\Delta x).$$
(2.17)

Nous disposons ainsi d'une solution de référence en une dimension qui nous permettra de valider la résolution numérique particulaire de Vlasov-Poisson (Chapitre 4).

2.3.3 Résultats et interprétations

Dans cette section, nous analysons l'influence des paramètres ε et γ sur la solution du problème de Poisson non linéaire que nous venons d'étudier. Nous en tirons des conclusions quant aux tailles respectives du plasma et de la gaine.

Nous caractérisons ces différentes zones suivant la proportion entre les densités ionique et électronique. Nous proposons de manière arbitraire, mais en accord avec ce qui est fait classiquement [11], les critères suivant :

Si $n_i > n_e > 0,99 n_i$ le plasma est supposé neutre.

Si $0, 99 n_i > n_e > 0, 01 n_i$, on est dans la gaine.

Si $n_e < 0,01 n_i$, on considère que l'influence des électrons est négligeable. Dans le cas de la diode d'extraction bidimensionnelle du Chapitre 1.5, ce critère délimiterait le faisceau.

La température et la densité du plasma neutre sont

$$T_e = 10 \,\mathrm{eV},$$

 $n_0 = 10^{16} \,\mathrm{m}^{-3}.$

Dans ces conditions, la longueur de Debye est

$$\lambda_D = 2,35.10^{-4} \,\mathrm{m}$$
.

Il en découle que la dimension caractéristique et la fréquence de collision ne dépendent plus que du paramètre ε , respectivement par

$$\bar{x} = \frac{\lambda_D}{\varepsilon}$$

 et

$$\nu = \frac{1}{\lambda_D} \sqrt{\frac{2kT_e}{m_i}} \varepsilon = \varepsilon \sqrt{\frac{2n_0 e^2}{\varepsilon_0 m_i}}.$$

On donne dans le tableau suivant les valeurs de ces deux quantités pour différents ε :

ε	$\bar{x}(m)$	$\nu(\mathrm{s}^{-1})$
10^{-1}	$2,3510^{-3}$	$1,3410^{7}$
10^{-2}	$2,3510^{-2}$	$1,3410^{6}$
10^{-3}	$2,3510^{-1}$	$1,3410^5$
410^{-4}	$5,87510^{-1}$	$7,38710^4$

Comme n_0 et T_e sont fixés, la fréquence de collision est proportionnelle à la densité des neutres, n_n (Section 1.2.3). Diminuer ε revient à diminuer n_n , et donc ν . Comme le taux d'ionisation est donné par

$$s(n_e) = \nu n_0 \left(\frac{n_e}{n_0}\right)^{\gamma}$$

et que $n_e < n_0$, il augmente quand γ diminue (ε fixé) ou quand ε augmente (γ fixé). Quand l'ionisation est plus importante, il y a plus d'ions créés et le seuil $0, 99 n_i > n_e$ est atteint plus vite : la taille du plasma neutre diminue. D'autre part, comme $n_i - n_e$ croît plus vite, la dérivée seconde du potentiel augmente plus rapidement (par l'équation de Poisson), ce qui accélère la séparation de charge, si bien que la gaine va être plus réduite. Cependant, un phénomène contraire se produit dans la gaine : comme la séparation de charge augmente, n_e diminue, et par conséquent le taux d'ionisation dans la gaine est plus faible (les ions sont créés en moins grande quantité). On peut donc s'attendre à ce que la taille de la gaine diminue moins que la taille du plasma. Nous pouvons résumer cela en écrivant que quand γ diminue (ε fixé) ou quand ε augmente (γ fixé),

- la taille de la gaine diminue,
- la taille du plasma neutre diminue,
- la gaine est de moins en moins petite devant la zone plasma, c'est-à-dire que la taille de la gaine diminue moins vite que celle du plasma.

Nous allons maintenant déterminer le potentiel et les densités à l'aide des sections précédentes, avec l'intention de vérifier l'analyse que nous venons de faire.

Nous représentons sur la Figure 2.2 le potentiel Φ solution de l'équation différentielle (2.12) en fonction de ε (pour $\gamma = 0$) et en fonction de γ (avec $\varepsilon = 10^{-2}$). Nous avons validé ces résultats en les comparant avec ceux obtenus dans [43].

Nous utilisons ensuite (2.17) pour tracer sur la Figure 2.3 les densités ionique et électronique selon les variations de ces deux paramètres. Il est plus aisé d'en tirer des conclusions.

Nous résumons dans les tableaux suivants les valeurs que nous avons trouvées pour la position x_g de la limite plasma-gaine et pour la borne supérieure x_d de la gaine. Nous indiquons également la largeur de la gaine, adimensionnée et réelle, le rapport de la taille de la gaine sur la taille de la zone plasma et la taille du plasma, en millimètres.

/ 0.

ε	x_g	x_d	gaine (adim)	gaine (mm)	$\frac{x_d - x_g}{x_g}$	plasma (mm)
10^{-1}	0,125	0,827	$0,702 \simeq 7\varepsilon$	1,65	5,616	0,294
10^{-2}	0,307	0,438	$0,130 \simeq 13\varepsilon$	3,07	0,427	7,21
10^{-3}	0,344	0,359	$0,015 \simeq 15\varepsilon$	3, 51	0,0436	80,84

 $\gamma = 1$:

ε	x_g	x_d	gaine (adim)	gaine (mm)	$\frac{x_d - x_g}{x_g}$	plasma (mm)
10^{-1}	0,177	1,066	$0,889 \simeq 9\varepsilon$	2,09	5,022	0,415
10^{-2}	0,375	0,5172	$0,1421 \simeq 14\varepsilon$	3,34	0,3792	8,81
10^{-3}	0,406	0,421	$0,015 \simeq 15\varepsilon$	3, 59	0,0369	95, 4
410^{-4}	0,405827	0,411976	$0,006149 \simeq 15\varepsilon$	3,61	0,01515	238, 4

Chapitre 2. Etude monodimensionnelle : détermination des conditions limites sur Γ_i 44

ε	x_g	x_d	gaine (adim)	gaine (mm)	$\frac{x_d - x_g}{x_g}$	plasma (mm)
10^{-1}	0,393	1,290	$0,897 \simeq 9\varepsilon$	2, 1	2,282	0,924
10^{-2}	0,473	0,621	$0,148 \simeq 15\varepsilon$	3,47	0,3128	11,1
10^{-3}	0,495	0,510	$0,015 \simeq 15\varepsilon$	3,52	0,03	116, 3
410^{-4}	0,4941	0,5003	$0,0062 \simeq 15\varepsilon$	3,64	0,0125	290

 $\underline{\gamma=2}$:

On constate que pour γ fixé, quand ε augmente, le rapport entre les dimensions de la gaine et de la zone plasma augmente, tandis que les tailles des deux zones diminuent. On a une évolution identique quand on fixe ε et qu'on diminue γ . Ces observations sont bien conformes à l'analyse précédente.

On remarque également que la taille de la gaine est de l'ordre de la dizaine de longueurs de Debye (ε étant la longueur de Debye adimensionnée). Pour ε suffisamment petit, cette taille varie peu en fonction des valeurs de γ et de ε .



FIGURE 2.2 – Solution du problème de Cauchy en fonction des paramètres γ et $\varepsilon.$ $\Phi_c=6.$





FIGURE 2.3 – Densités ionique (rouge) et électronique (noir) en fonction de γ et $\varepsilon.$ $\Phi_c=100$

2.4 Conditions aux limites sur la fonction de distribution f_i

Le domaine Ω_{1D} défini dans la section précédente recouvre deux sous-domaines, le plasma neutre et la gaine, dont les caractéristiques sont différentes. Dans cette section, nous allons définir deux modèles approchés, l'approximation quasi-neutre et l'approximation de gaine, respectivement valables sur les deux sous-domaines précédemment cités. Les résultats analytiques obtenus à la suite de l'étude de l'approximation quasi-neutre permettront de définir la distribution ionique sur la frontière d'injection Γ_i .

2.4.1 Approximation quasi-neutre

Nous restons dans le cadre du modèle de Langmuir, en gardant les notations de la Figure 2.1. On peut donc appliquer le Lemme 1, qui donne la solution f de l'équation de Vlasov. On en déduit la densité ionique, adimensionnée à partir de la relation (2.9) :

$$n_i(x) = \int_0^x \frac{s(x_1)}{\sqrt{2(\Phi(x) - \Phi(x_1))}} dx_1.$$

Nous supposons maintenant que le plasma est quasi-neutre, si bien que le potentiel doit vérifier l'égalité

$$n_i(\Phi) = n_e(\Phi), \tag{2.18}$$

que nous appelons l'équation plasma. Cette approximation de plasma neutre revient à poser $\varepsilon = 0$ dans l'équation de Poisson (2.4). Puisque le potentiel est monotone, chercher $\Phi = \Phi(x)$ solution de (2.18) est équivalent à chercher $x = x(\Phi)$ solution de

$$n_i(x) = n_e(x)$$

Trouver Φ et f solution du système de Vlasov-Poisson quasi-neutre sur Ω_{1D} revient donc à trouver $x = x(\Phi)$ solution de l'équation plasma, que nous écrivons sous la forme

$$\int_0^x \frac{s(x_1)}{\sqrt{2(\Phi(x) - \Phi(x_1))}} dx_1 - e^{-\Phi(x)} = 0, \qquad (2.19)$$

avec

$$s(x_1) = \sqrt{2} \exp(-\gamma \Phi(x_1))$$

Nous établissons tout d'abord le résultat suivant, en notant $x'(\Phi) = \frac{dx}{d\Phi}$ et $\Phi'(x) = \frac{d\Phi}{dx}$:

Théorème 5

La solution $x(\Phi)$ de l'approximation quasi-neutre vérifie

$$x'(\Phi) = \frac{\sqrt{2}}{\pi s(\Phi)} \left(\frac{1}{\sqrt{\Phi}} - 2D\left(\sqrt{\Phi}\right) \right)$$
(2.20)

où D est l'intégrale de Dawson définie par :

$$D(u) = e^{-u^2} \int_0^u e^{t^2} dt = \frac{1}{2} \int_0^{u^2} \frac{e^{-y}}{\sqrt{u^2 - y}} dy.$$

Pour cela, nous avons besoin du résultat préliminaire suivant (transformée de Hilbert) [40] :

Lemme 6

La transformation $f \to H(f)$ définie par

$$H(f)(u) = \int_0^u \frac{f(y)}{\sqrt{u-y}} dy = g(u), \quad u \ge 0$$

est inversible, et la transformation inverse $g \to H^{-1}(g)$ est donnée par

$$H^{-1}(g)(u) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{g(0)}{\sqrt{u}} + \int_0^u \frac{g'(y)}{\sqrt{u-y}} dy \right), \quad x \ge 0.$$

Preuve du Théorème 5. En faisant le changement de variable $\Psi = \Phi(x_1)$ dans (2.19), l'équation plasma peut s'écrire :

$$\int_0^{\Phi} \frac{s(\Psi)x'\Psi}{\sqrt{2(\Phi-\Psi)}} d\Psi = e^{-\Phi}$$

On applique le Lemme 6 à cette équation en prenant

$$\begin{cases} f(\Psi) = \frac{s(\Psi)x'(\Psi)}{\sqrt{2}}\\ g(\Phi) = e^{-\Phi}, \end{cases}$$

de sorte que

$$\frac{s(\Phi)x'(\Phi)}{\sqrt{2}} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{\sqrt{\Phi}} - \int_0^\Phi \frac{e^{-\Psi}}{\sqrt{\Phi - \Psi}} d\Psi \right),$$

ce qui donne bien (2.20).

Dans le cas où $\gamma = 0$, on a $s(\Phi) = \sqrt{2}$. Si on remarque que

$$\frac{d}{dx}D(\sqrt{x}) = \frac{1}{2\sqrt{x}} - D(\sqrt{x}), \qquad (2.21)$$

on peut déduire immédiatement de (2.20) la solution de l'équation plasma :

$$x(\Phi) = \frac{2}{\pi} D(\sqrt{\Phi}). \tag{2.22}$$

Cette fonction est représentée sur la Figure 2.4. Elle n'est pas monotone. Puisque nous cherchons une fonction x croissante, seule la partie gauche de la courbe est admissible.

Plus généralement ($\gamma = 0, 1, 2$), nous montrons le théorème suivant :



FIGURE 2.4 – Solution $x(\Phi)$ de l'approximation plasma, $\gamma = 0$.

Théorème 7

Il existe un nombre Φ_a strictement positif tel que la fonction $x(\Phi)$ n'est monotone croissante que sur $[0, \Phi_a]$. De plus, la valeur de Φ_a est indépendante de la valeur de γ .

Preuve. La fonction x' s'annule en un point unique, noté Φ_a qui vérifie

$$\frac{1}{\sqrt{\Phi_a}} = 2D\left(\sqrt{\Phi_a}\right).$$

Quand $\Phi \to 0$,

$$x'(\Phi) \simeq \frac{1}{\pi e^{-\gamma \Phi} \sqrt{\Phi}} > 0,$$

alors que pour $\Phi \to +\infty$,

$$x'(\Phi) \simeq \frac{-2}{\pi e^{-\gamma\Phi}} D\left(\sqrt{\Phi}\right) < 0.$$

La fonction $x(\Phi)$ est donc strictement croissante sur $[0, \Phi_a]$ et strictement décroissante sur $]\Phi_a, +\infty[$. La valeur Φ_a est *indépendante du taux d'ionisation*, et on calcule

$$\Phi_a \simeq 0,854$$





FIGURE 2.5 – Profil de la fonction $g(\Phi) = \frac{1}{\sqrt{\Phi}} - 2D\left(\sqrt{\Phi}\right)$.

Notons $a_{\gamma} = x(\Phi_a)$. Cette valeur dépend du type d'ionisation.

• Pour $\gamma = 0$, (2.22) donne

$$a_0 = \frac{2}{\pi} D(\sqrt{\Phi_a}).$$

• Pour $\gamma = 1$, on a

$$x'(\Phi) = \frac{\sqrt{2}}{\pi e^{-\Phi}} \left(\frac{1}{\sqrt{\Phi}} - 2D\left(\sqrt{\Phi}\right) \right),$$

c'est-à-dire, en utilisant (2.21) et en intégrant entre 0 et Φ ,

$$x(\Phi) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\Phi} e^{\psi} \frac{d}{d\psi} \left(D\left(\sqrt{\psi}\right) \right) d\psi.$$

En intégrant par parties, on obtient

$$x(\Phi) = \frac{2}{\pi} \left(-\int_0^{\Phi} e^{\psi} D(\sqrt{\psi}) d\psi + e^{\Phi} D(\sqrt{\Phi}) \right).$$

• Pour $\gamma = 2$, les mêmes outils permettent de calculer

$$\begin{aligned} x(\Phi) &= \frac{1}{\pi} \int_0^{\Phi} e^{2\psi} \left(\frac{1}{\sqrt{\psi}} - 2D\left(\sqrt{\psi}\right) \right) ds \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{2\Phi} e^t \frac{d}{dt} \left(D\left(\sqrt{t/2}\right) \right) dt \quad , \quad t = 2\psi \\ &= \frac{2}{\pi} \left(e^{2\Phi} D(\sqrt{\Phi}) - \int_0^{2\Phi} e^t D(\sqrt{t/2}) dt \right). \end{aligned}$$

On calcule les valeurs de $a_{\gamma} = x(\Phi_a)$:

$$\begin{cases} \gamma = 0 \Rightarrow a_0 = 0,3444, \\ \gamma = 1 \Rightarrow a_1 = 0,4046, \\ \gamma = 2 \Rightarrow a_2 = 0,4920. \end{cases}$$

Revenons au potentiel solution de l'approximation quasi-neutre; il n'est défini que pour $x \leq a_{\gamma}$. Nous voyons sur la Figure 2.6 qu'il est bivalué : seule la branche inférieure est physiquement admissible puisque le potentiel doit être monotone croissant.

Remarque. On a les résultats suivants :

$$\lim_{x \to 0} \Phi'(x) = 0,$$
$$\lim_{x \to a_{\gamma}} \Phi'(x) = +\infty.$$

Ces limites sont déduites respectivement de

$$\lim_{\Phi \to 0} x'(\Phi) = \lim \frac{\sqrt{2}e^{\gamma \Phi}}{\pi \sqrt{\Phi}} = +\infty$$

et de

$$x'(\Phi_a) = 0.$$



FIGURE 2.6 – Potentiel Plasma.

2.4.2 Compatibilité avec le problème de Poisson non linéaire

Notre propos est ici de vérifier dans quelle mesure les résultats de l'approximation quasi-neutre sont équivalents à ceux du problème de Poisson non linéaire. Nous indiquons à nouveau dans le tableau ci-dessous les positions de l'interface plasma-gaine trouvées dans la Section 2.3, et nous constatons que cette position tend vers la limite de validité de l'approximation quasi-neutre quand ε tend vers 0 (colonne de droite).

ε	10^{-1}	10^{-2}	10^{-3}	410^{-4}	0
$a_{\gamma=0}$	0,125	0,307	0,344		0, 3444
$a_{\gamma=1}$	0,177	0,375	0,406	0,405827	0,4046
$a_{\gamma=2}$	0,393	0,473	0,495	0,4941	0,492



FIGURE 2.7 – Solution de l'équation plasma comparée aux solutions du problème de poisson non linéaire quand $\varepsilon \to 0$.

On rappelle également sur la Figure 2.7 pour $\gamma = 0$ et pour différentes valeurs de ε les solutions Φ_{ε} du problème de Poisson non linéaire étudié dans la section précédente et on

les complète par la solution de l'approximation quasi-neutre, notée Φ_{neutre} . On constate sur ces courbes que

$$\lim_{\varepsilon \to 0} \Phi_{\varepsilon}(x) = \Phi_{neutre}(x)$$

pour $x < a_0$.

On peut donc voir l'approximation quasi-neutre, là où elle est définie, comme une limite du problème de Poisson, $\varepsilon^2 \frac{d^2 \Phi}{dx^2} = n_i - n_e$ quand $\varepsilon \to 0$. En effet, le terme $\varepsilon^2 \frac{d^2 \Phi}{dx^2}$ est faible quand x est proche de 0 puisque le potentiel croît très lentement dans cette région; on a donc $n_i \simeq n_e$. Quand on s'éloigne du centre du plasma, la dérivée seconde augmente et $\varepsilon^2 \frac{d^2 \Phi}{dx^2}$ n'est plus négligeable, et $n_i - n_e \neq 0$: la solution du problème aux conditions initiales et la solution plasma divergent, et ce d'autant plus vite que ε est grand.

Remarque. Nous constatons également que la taille de la gaine diminue quand ε tend vers 0 (la taille de la gaine est de l'ordre de 15ε) : dans le cas de l'approximation quasineutre, on peut considérer que la gaine est infiniment mince, c'est-à-dire que les ions quittent le plasma en $x = a_{\gamma}$, alors que les électrons restent dans $[0, a_{\gamma}]$.

Application à la résolution du problème de Poisson non linéaire.

En considérant l'approximation quasi-neutre comme une situation limite du problème de Poisson non linéaire, nous pouvons maintenant proposer un autre moyen de lever l'indétermination en 0 de l'équation différentielle (2.12), qui permet de trouver la solution de ce problème. Pour ε suffisamment petit, nous supposons que la solution de l'approximation quasi-neutre et celle de (2.12) sont équivalentes au voisinage de 0. Elles vérifient toutes deux les conditions $\Phi(0) = \Phi'(0) = 0$.

Nous repartons de l'équation (2.20) (expression de $x'(\Phi)$) : le changement de variable $\Psi = \sqrt{\Phi}$ donne

$$\frac{dx}{d\Psi}(\Psi) = \frac{2}{\pi \exp(-\gamma \Psi^2)} \left(1 - 2\Psi D\left(\Psi\right)\right),\,$$

de sorte que

$$\frac{dx}{d\Psi}(0) = \frac{2}{\pi}.$$

Au voisinage de l'origine, où x(0) = 0, un développement de x au premier ordre s'écrit

$$x(\Psi) = \frac{2}{\pi}\Psi + o(\Psi),$$

 soit

$$\Phi(x) \simeq \frac{\pi^2}{4} x^2$$
 pour $x \simeq 0$.

Lors de la résolution numérique de (2.12), il est donc possible de lever l'indétermination à l'origine en prenant

$$\Phi_j = \frac{\pi^2}{4} j^2 \Delta x^2$$
 , $j = 0, 1, ...$

Rappelons que dans la Section 2.3.2 nous avons montré que $\lim_{\varepsilon \to 0} \alpha_2 = \frac{\pi^2}{4} (\Phi(x) \simeq \alpha_2 x^2 pour x \simeq 0)$. Cela nous renforce dans notre interprétation de l'approximation quasi-neutre comme un problème de Poisson limite.

2.4.3 La fonction de distribution de l'approximation quasi-neutre

A partir de maintenant, l'indice "p" désignera les grandeurs (analytiques) relatives à l'approximation quasi-neutre. Comme Φ est une fonction monotone de x, on peut passer en variables (Φ, v) plutôt qu'en variables (x, v).

Théorème 8

 $Si \Phi : [0, a] \rightarrow [0, \Phi_a]$ est la solution de l'équation plasma, la fonction de distribution ionique solution de l'équation de Vlasov s'écrit

$$f_p(\Phi, v) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{\pi} \left(\frac{1}{\sqrt{\Phi - \frac{v^2}{2}}} - 2D(\sqrt{\Phi - \frac{v^2}{2}}) \right), 0 < v < \sqrt{2\Phi} \\ 0, \ sinon. \end{cases}$$
(2.23)

Preuve. Nous avons établi dans la Section 2.4 que, en variables physiques, la solution de l'équation de Vlasov est donnée par la relation

$$f(x,v) = \int_0^x \sqrt{\frac{m_i}{2e}} \frac{s(y)}{\sqrt{\Phi(y) - \Phi(x)}} \delta(v - v(y,x)) dy.$$

En variables a dimensionnées sur $\Omega_{1D}\times [0,\sqrt{2\Phi_c}],$ elle s'écrit par conséquent

$$f(x,v) = \int_0^x \frac{s(y)}{\sqrt{2(\Phi(x) - \Phi(y))}} \delta(v - \sqrt{2(\Phi(x) - \Phi(y))}) dy.$$

Avec le changement de variable $\Psi = \Phi(y)$, elle devient

$$f(\Phi, v) = \int_0^{\Phi} \frac{s(\Psi)}{\sqrt{2(\Phi - \Psi)}} x'(\Psi) \delta(v - \sqrt{2(\Phi - \Psi)}) d\Psi,$$

pour $(\Phi, v) \in [0, \Phi_c] \times [0, \sqrt{2\Phi_c}]$. Remplaçons $x'(\Psi)$ par sa valeur donnée par (2.20); il en découle que

$$f(\Phi, v) = \int_0^{\Phi} \frac{h(\Psi)}{\sqrt{\Phi - \Psi}} \delta(v - \sqrt{2(\Phi - \Psi)}) d\Psi,$$

en notant

$$h(\Psi) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{1}{\sqrt{\Psi}} - 2D(\sqrt{(\Psi)}) \right).$$

Multiplions f par une fonction test $\chi \in C_0^0(\mathbb{R})$ et intégrons sur $v \in \mathbb{R}$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\Phi, v)\chi(v)dv = \int_{0}^{\Phi} \frac{h(\Psi)}{\sqrt{\Phi - \Psi}}\chi(\sqrt{2(\Phi - \Psi)})d\Psi$$

Si nous effectuons le changement de variable $v = \sqrt{2(\Phi - \Psi)}$, cette relation est équivalente à

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(\Phi, v)\chi(v)dv = \sqrt{2}\int_{0}^{\sqrt{2\Phi}} h(\Phi - \frac{v^2}{2})\chi(v)dv$$

ce qui permet bien de retrouver (2.23).

Corollaire 9

Cette fonction de distribution est indépendante du taux d'ionisation. D'autre part, elle vérifie

$$\lim_{v \to v_{max}} f_p(\Phi, v) = +\infty$$

avec $v_{max} = \sqrt{2\Phi}$ (Fig. 2.8).



FIGURE 2.8 – Approximation quasi-neutre : fonction de distribution pour $\Phi = 0.1718$.

Par intégration de f_p , nous pouvons en calculer les premiers moments, et ainsi caractériser le plasma

densité :
$$n_p(\Phi) = e^{-\Phi}$$
,
courant : $j_p(\Phi) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} D(\sqrt{\Phi})$, (2.24)

énergie :
$$\frac{1}{2} (1 - e^{-\Phi})$$
. (2.25)

La densité ionique est bien égale à la densité électronique, ce qui est bien consistant avec l'hypothèse de quasi-neutralité. La densité de courant s'obtient à partir de

$$j_p(\Phi) = \int f_p(\Phi, v) v dv = \int_0^{\sqrt{2\Phi}} f_p(\Phi, v) v dv$$

en remplaçant f_p par sa valeur (2.23) et en invoquant le fait que $\frac{d}{dx}D(\sqrt{x}) = \frac{1}{2\sqrt{x}} - D(\sqrt{x})$. Remarquons que dans le cas où $\gamma = 0$, les résultat (2.22) et (2.24) donnent

$$x(\Phi) = \frac{j_p(\Phi)}{\sqrt{2}}.$$
(2.26)

Le calcul de l'énergie, $k_p(\Phi) = \frac{1}{2} \int f(\Phi, v) v^2 dv$, est quant à lui plus technique [10].

2.4.4 Approximation de gaine

Les résultats obtenus jusqu'ici dans ce chapitre sont suffisants pour déterminer les conditions limites sur la frontière d'injection. Nous allons compléter l'étude du modèle simplifié de Langmuir par cette section, dont l'intérêt sera de fournir une validation supplémentaire de nos travaux. Nous avons défini l'approximation quasi-neutre, valable sur la zone plasma, $[0, a_{\gamma}] \subset \Omega_{1D}$. Nous allons maintenant étudier un autre modèle qui nous permettra de donner une solution approchée du système de Vlasov-Poisson dans la gaine, c'est-à-dire $\Omega_{1D} \setminus [0, a_{\gamma}] =]a_{\gamma}, L_c]$.

Pour des valeurs suffisamment petites de ε , nous supposons que la gaine est petite par rapport à la zone de validité de l'approximation quasi-neutre, en accord avec les résultats de la Section 2.3.3. Nous pouvons donc considérer que la fraction d'ions produits dans la gaine est négligeable, ce qui nous permet de faire l'hypothèse (g1):

(g1) L'ionisation est négligeable dans la gaine, de telle sorte que $s(n_e(x)) = 0$ pour $a_{\gamma} < x < L_c$.

D'autre part, nous faisons l'hypothèse que la solution de l'équation plasma est égale à la solution du problème de Vlasov-Poisson dans la zone quasi-neutre pour ε suffisamment petit (rappelons qu'elle en est la limite quand $\varepsilon \to 0$), ce que l'on traduit par l'hypothèse (g2):

(g2) L'approximation quasi-neutre est valable en $x \leq a_{\gamma}$.

Ces deux hypothèses permettent d'établir le modèle dit d'approximation de gaine, défini sur $]a_{\gamma}, L_c]$. Nous allons déterminer le potentiel solution du système de Vlasov-Poisson (2.4) (2.5) dans le cadre de ces hypothèses.

Commençons par réécrire ce système (en stationnaire) en effectuant le changement de variable $x = L_c - \varepsilon y$ et en rappelant que $s(n_e) = 0$:

$$\begin{cases} v\nabla_y f + \nabla \Phi \nabla_v f = -\varepsilon s(n_e)\delta(v) = 0\\ \frac{d^2 \Phi}{dy^2} = n_i - n_e\\ n_e = e^{-\phi} \end{cases}$$
(2.27)

On peut alors démontrer le théorème suivant :

Théorème 10

Le potentiel solution de l'approximation de gaine vérifie pour $y \in [0, +\infty)$ l'équation différentielle

$$\left(\frac{d\Phi}{dy}\right)^2 = \frac{4}{\pi} \int_0^{\Phi_a} \sqrt{\Phi - \Psi} \left(\frac{1}{\sqrt{\Psi}} - 2D(\sqrt{\Psi})\right) d\Psi - 2(1 - e^{-\Phi}).$$
(2.28)

De plus, on a

$$\begin{cases} \lim_{y \to \infty} \Phi(y) = \Phi_a \\ \lim_{y \to \infty} f(y, v) = f_p(a_\gamma, v) \end{cases}$$
(2.29)

et

$$\begin{cases} \Phi(0) = \Phi_c \\ f(0, v) = 0. \end{cases}$$
(2.30)

Preuve. Les courbes caractéristiques de l'opérateur de Vlasov (2.27) sont données par

$$v^2 - 2\Phi(y) = cte.$$
 (2.31)

Par conséquent, en notant $y_{\gamma} = \frac{L-a_{\gamma}}{\varepsilon}$ et $\Phi_{\gamma} = \Phi(y_{\gamma})$, on a

$$v^{2}(y_{\gamma}) - 2\Phi_{\gamma} = v(y)^{2} - 2\Phi(y),$$

ou

$$v(y_{\gamma}) = \sqrt{v^2 - 2\Phi(y) + 2\Phi_{\gamma}}, \qquad (2.32)$$

ce qui impose $v > \sqrt{2(\Phi(y) - \Phi_{\gamma})}$, en notant v = v(y).

La fonction Φ étant monotone sur $[0, y_{\gamma}]$, f est constante sur les courbes (2.31) si bien que, en utilisant (2.32),

$$f(y,v) = f(y_{\gamma}, \sqrt{v^2 - 2\Phi(y) + 2\Phi_{\gamma}}$$
, $v > \sqrt{(2(\Phi(y) - \Phi_{\gamma}))}$.

On obtient la densité ionique en y par intégration de f(v) sur $\sqrt{(2(\Phi(y) - \Phi_{\gamma}))}, +\infty[$:

$$n_i(y) = \int_{\sqrt{2(\Phi(y) - \Phi_{\gamma})}}^{\infty} f(y_{\gamma}, \sqrt{v^2 - 2\Phi(y) + 2\Phi_{\gamma}}) dv,$$

soit, avec le changement de variable $w = \sqrt{v^2 - 2(\Phi(y) - \Phi_{\gamma})},$

$$n_i(y) = \int_0^\infty f(y_\gamma, w) \frac{w}{\sqrt{w^2 + 2(\Phi(y) - \Phi_\gamma)}} dw.$$
 (2.33)

Comme nous l'avons fait jusqu'à présent, étant donné que le potentiel est monotone, nous écrivons $f(\Phi = \Phi_{\gamma}, w) = f(y = y_{\gamma}, w)$. En injectant (2.33) dans l'équation de Poisson (2.27), nous sommes donc amenés à résoudre une équation différentielle du second ordre,

$$\frac{d^2\Phi}{dy^2} = \int_0^{\sqrt{2\Phi_\gamma}} f(\Phi_\gamma, w) \frac{w}{\sqrt{w^2 + 2(\Phi(y) - \Phi_\gamma)}} dw - e^{-\Phi(y)}$$
(2.34)

On se ramène à une équation du premier ordre en multipliant (2.34) par $2\frac{d\Phi}{dy}$ et en intégrant de y à y_{γ} :

$$\left(\frac{d\Phi}{dy}\right)_{y_{\gamma}}^{2} - \left(\frac{d\Phi}{dy}\right)^{2} = I_{y_{\gamma}} - I_{y} + 2(e^{-\Phi_{\gamma}} - e^{-\Phi})$$
(2.35)

avec

$$I_{y_{\gamma}} = 2 \int_0^{\sqrt{2\Phi_{\gamma}}} f(\Phi_{\gamma}, v) v^2 dv \qquad (2.36)$$

 et

$$I_y = 2 \int_0^{\sqrt{2\Phi_{\gamma}}} f(\Phi_{\gamma}, v) \sqrt{v^2 + 2(\Phi - \Phi_{\gamma})} v dv.$$
 (2.37)

Lorsque $y = y_{\gamma} = \frac{L_c - a_{\gamma}}{\varepsilon}$, soit $x = a_{\gamma}$, et que $\varepsilon = 0$, l'approximation quasi-neutre doit être vérifiée de sorte que

$$\begin{cases} \Phi_{\gamma} = \Phi_a \\ f(\Phi_{\gamma}, v(\Phi_{\gamma})) = f_p(\Phi_{\gamma}, v(\Phi_{\gamma})) \end{cases}$$

Cela revient à rejeter le point $y_{\gamma} = \frac{L_c - a_{\gamma}}{\varepsilon}$ à l'infini et donne le résultat (2.29). Cela nous permet également d'écrire que

$$\left(\frac{d\Phi}{dy}\right)_{y\gamma} = \lim_{y \to \infty} \frac{d\Phi}{dy} = 0.$$
(2.38)

Avec f_p donnée par (2.23) et l'énergie k_p donnée par (2.25), (2.36) s'écrit

$$I_{y_{\gamma}} = 4k_p(\Phi_a) = 2(1 - e^{-\Phi_a}), \qquad (2.39)$$

tandis que (2.37) donne

$$I_{y} = 2\frac{\sqrt{2}}{\pi} \int_{0}^{\sqrt{2\Phi_{a}}} \frac{1}{\sqrt{\Phi_{a} - \frac{v^{2}}{2}}} - 2D(\sqrt{\Phi_{a} - \frac{v^{2}}{2}})\sqrt{v^{2} + 2(\Phi - \Phi_{a})}dv$$
$$= \frac{4}{\pi} \int_{0}^{\Phi_{a}} \sqrt{\Phi - \Psi} \left(\frac{1}{\sqrt{\Psi}} - 2D(\sqrt{\Psi})\right)d\Psi,$$
(2.40)

avec le changement de variable $\Psi = \Phi_a - \frac{v^2}{2}$.

Les résultats (2.38) (2.39) et (2.40) permettent de réécrire l'équation (2.35), et de montrer que le potentiel de gaine est bien solution de (2.28).

Le résultat (2.30) vient des conditions limites du problème de Vlasov-Poisson à droite dans le modèle de Langmuir.■

Nous pouvons simplifier l'équation (2.28) en écrivant

$$\int_0^{\Phi_a} \sqrt{\Phi - \Psi} \left(\frac{1}{\sqrt{\Psi}} - 2D(\sqrt{\Psi}) \right) d\Psi = 2 \int_0^{\Phi_a} \sqrt{\Phi - \Psi} \left(\frac{d}{d\Psi} D(\sqrt{\Psi}) \right) d\Psi$$

(d'après la remarque (2.21)). Une intégration par parties et le changement de variable $t = \sqrt{\Psi}$ nous conduisent à écrire que cette intégrale est égale à

$$2\left(\sqrt{\Phi-\Phi_a}D(\sqrt{\Phi_a})+\int_0^{\sqrt{\Phi_a}}\frac{t}{\sqrt{\Phi-t^2}}D(t)dt\right).$$

En notant

$$F(\Phi) = \frac{8}{\pi} \left(\sqrt{\Phi - \Phi_a} D(\sqrt{\Phi_a}) + \int_0^{\sqrt{\Phi_a}} \frac{t}{\sqrt{\Phi - t^2}} D(t) dt \right) - 2\left(1 - e^{-\Phi}\right),$$

l'équation de gaine (2.28) devient donc

$$\left(\frac{d\Phi}{dy}\right)^2 = F(\Phi).$$

Pour obtenir le potentiel solution du système Vlasov-Poisson inverse (2.27), il reste à compléter cette équation par la condition initiale $\Phi(0) = \Phi_c$. La résolution numérique de ce problème de Cauchy se fait par une méthode d'Euler, en posant $\Phi_0 = \Phi_c$ et en itérant la relation

$$\Phi_{j+1} = \Phi_j - \Delta y \sqrt{F(\Phi_j)},$$

car on cherche un potentiel décroissant de $[0, +\infty[$ sur $[\Phi_c, \Phi_a[$. On poursuit le calcul tant que $\Phi_{i+1} > \Phi_a$, puisqu'en-deçà de cette valeur c'est l'approximation quasi-neutre qui est valable.

Sur la Figure 2.9, on trace la solution numérique du problème de Poisson non linéaire avec $\gamma = 0$ et $\varepsilon = 0,01$ (noir), la solution de gaine (bleu) et la solution plasma (rouge).



FIGURE 2.9 – Solution du problème de Poisson non linéaire et solutions approchées (approximation plasma et approximation de gaine).

Dans la gaine (à droite), la densité électronique tend vers 0 de sorte que le taux d'ionisation $s(n_e)$ tend vers 0 : l'hypothèse g1 est bien vérifiée et on constate effectivement que la solution du problème de Poisson tend vers la solution de gaine quand on s'éloigne du centre du plasma. De l'autre côté, quand x tend vers 0, le potentiel de gaine tend asymptotiquement vers Φ_a (hypothèse g2). On remarque bien sur cette Figure que les deux approximations que nous avons faites dans cette section permettent de valider la solution du problème de Poisson que nous avons trouvée.

Remarque. Prendre $\varepsilon = 0$ conduit dans l'approximation quasi-neutre (échelle des x) à avoir une gaine infiniment mince et dans l'approximation de gaine (échelle des y) à rejeter le plasma à l'infini.

2.5 Application à la détermination des conditions limites sur Γ_i

2.5.1 Conditions limites

Il faut faire en sorte que la position de la frontière émissive permette d'appliquer les résultats obtenus jusqu'ici dans ce chapitre. On note δl la distance entre l'électrode plasma et Γ_i et $L_i = L_c - \delta l$ la position de la frontière émissive.

La distance δl doit être suffisamment grande pour que

- le comportement du plasma en L_i soit monodimensionnel;
- la solution du problème de Poisson non-linéaire et celle de l'approximation quasineutre coïncident. Cette dernière n'a de sens que si

$$0 < L_c - \delta l < a_\gamma$$

D'autre critères, liés à la résolution numérique, seront précisés dans la Section 3.2.

Dans ces conditions, nous pouvons utiliser les résultats obtenus dans les Sections 2.3 et 2.4 pour calculer Φ_i et f_i , les valeurs du potentiel et de la fonction de distribution sur la frontière émettrice :

nous avons déterminé $\Phi_{CI} : [0, L_c] \to [0, \Phi_c]$ la solution de l'équation intégro-différentielle (2.12), équivalente au problème de Vlasov-Poisson dans le modèle de Langmuir. On calcule par interpolation (Fig. 2.10) la valeur du potentiel sur Γ_i ,



FIGURE 2.10 – Calcul du potentiel sur la frontière Γ_i .

Puisque Φ_{CI} et la solution de l'approximation quasi-neutre coïncident, il est possible d'appliquer le Théorème 8, de sorte que $f_p(\Phi_{CI}(x), v)$ (donnée par (2.23)) est solution de l'équation de Vlasov sur $[L_c - \delta l, a_{\gamma}]$.

La fonction de distribution sur Γ_i est alors

$$f_i(v) = f_p(\Phi_i, v).$$

2.5.2 Compatibilité de l'approximation quasi-neutre avec le modèle d'extraction

Nous pouvons vérifier que l'approximation quasi-neutre est compatible avec un certain nombre hypothèses faites lors de la construction du modèle :

1 : critère de Bohm :

Dans la zone plasma, la vitesse ionique est donnée par

$$u_i(x) = \frac{j_p(x)}{n_p(x)}$$
, pour $x \in [0, a]$

A la limite de cette zone, c'est-à-dire pour $x = a_{\gamma}$, on est à l'entrée de la gaine et la vitesse est alors

$$u_i(a_\gamma) = \frac{\frac{2\sqrt{2}}{\pi}D(\sqrt{\Phi_a})}{e^{-\Phi_a}} = 1,143,$$

quelle que soit la valeur de γ . Nous en déduisons que la vitesse exprimée en unités physiques est

$$u_{i_{\text{dim}}}(a) = 1,143 \sqrt{\frac{kT_e}{m_i}} [m \, s^{-1}].$$

Cette vitesse est supérieure à la vitesse acoustique ionique, $\sqrt{\frac{kT_e}{m_i}}$, si bien qu'elle vérifie le critère de Bohm défini dans la Section 1.3.

$\underline{2:\text{ions froids}}:$

La température ionique adimensionnée est définie par :

$$T_{i} = \frac{1}{n_{i}} \int |v - u_{i}|^{2} f dv = \frac{2k_{p}}{n_{p}} - u_{i}^{2}$$

de sorte que la température en a_{γ} est

$$T_i(x = a_\gamma) = T_i(\Phi = \Phi_a) = 0,046,$$

et donc que

$$T_{idim}(a_{\gamma}) = 0,046 T_{edim}(a_{\gamma}) [\mathrm{K}]$$

De plus, $\frac{dT_i}{d\Phi}(x)$ est positif sur $[0, a_{\gamma}]$ ce qui signifie que la température ionique est majorée par $T_{idim}(a_{\gamma})$ sur cet intervalle. D'autre part, on a supposé que les électrons se comportaient comme un fluide isotherme ($T_e = constante$). Nous pouvons en conclure que, sur le domaine de validité de l'approximation quasi-neutre, on a

$$T_{idim} < 0,046 T_{edim} \, [\text{K}],$$

ce qui permet de justifier l'hypothèse des ions froids dans le plasma neutre.

2.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous nous sommes ramenés à un problème monodimensionnel plus simple. Nous avons alors pu déterminer la solution du système de Vlasov-Poisson en résolvant numériquement une équation intégro-différentielle. Avec une hypothèse supplémentaire de quasi-neutralité, nous avons calculé analytiquement la fonction de distribution solution de l'équation de Vlasov. Ces deux résultats permettent de calculer le potentiel et la distribution ionique sur la frontière d'injection Γ_i dans le cas bidimensionnel. Pour cela, la position de Γ_i doit vérifier certains critères que nous avons précisés. Nous disposons ainsi de l'ensemble des conditions aux limites du domaine d'étude Ω .

Ce résultat, primordial dans l'élaboration du modèle d'extraction, n'est pas le seul que nous ayons obtenu. La modification des solutions en fonction de ε et γ montre que les variations de ces paramètres traduisent des solutions physiques différentes. Par ailleurs, la comparaison de la solution du problème de Poisson non linéaire à celles des approximations de gaine et quasi-neutre fournit un bon moyen de vérification des travaux effectués. Enfin, les résultats obtenus dans ce chapitre permettront de valider la méthode particulaire de résolution numérique dont la présentation fait l'objet du chapitre suivant. Chapitre 2. Etude monodimensionnelle : détermination des conditions limites sur Γ_i 62

Chapitre 3

Résolution numérique du système adimensionné

3.1 Introduction

Dans ce chapitre, on notera ρ la densité ionique, au lieu de n_i , et Γ_p plutôt que Γ_i la frontière d'injection; toutes les quantités indicées par p sont relatives à cette frontière. On notera également f_p^{1D} la fonction de distribution analytique monodimensionnelle déterminée dans la Section 2.4.3.

Nous commençons par rappeler dans la Section (3.2) le problème que nous voulons résoudre, et par préciser les conditions limites, en insistant sur le choix de la position de la frontière artificielle Γ_p . Nous discrétisons ensuite le système de Vlasov-Poisson en utilisant une méthode particulaire dont les principes généraux sont rappelés dans la Section 3.3. Nous insistons sur les particularités de cette méthode dans le cas qui nous intéresse. Le profil de la fonction de distribution en Γ_p nous conduit à proposer une technique adaptée d'injection des particules (Section 3.4). Nous traitons ensuite l'introduction de particules créées par ionisation, puis dans la Section 3.6 la linéarisation (par un algorithme de Newton) et la résolution (par une méthode de différences finies) de l'équation de Poisson. Nous complétons cette étude par la description d'une méthode de coalescence des particules destinée à réduire le nombre de particules présentes dans le domaine, tout en conservant l'essentiel des phénomènes physiques (Section 3.7). Pour finir, nous adaptons cette méthode particulaire à des coordonnées cylindriques (z, r), en vue de la résolution de problèmes axisymétriques (Section 3.8).

3.2 Rappel du problème adimensionné

Nous devons résoudre le problème suivant : **Problème** \mathcal{P} Soit $\Omega \subset IR^2$ un domaine borné de frontière Γ . On cherche Φ et ρ solutions stationnaires du système de Vlasov-Poisson instationnaire,

$$\begin{cases} \partial_t f + v \nabla_X f + \nabla \Phi \nabla_V f = s(n_e) \delta(V) \\ \varepsilon \Delta \Phi = (\rho - e^{-\Phi}), \end{cases}$$
(3.1)

où la densité électronique est donnée par la relation de Maxwell-Boltzmann,

$$n_e = e^{-\Phi}$$

et la densité ionique par

$$\rho(X) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(X, V, t) dV.$$

Ce système est complété par les conditions limites sur le potentiel et sur la distribution,

$$f(X, V, t) = f_{\Gamma}(X, V, t) \operatorname{sur} \Gamma, \ v \cdot \nu < 0,$$

où ν représente la normale extérieure à Γ , ainsi que par les conditions initiales

$$f(X, V, 0) = f_0(X, V).$$

Les méthodes numériques utilisées pour résoudre ce problème sont présentées sur le domaine simplifié introduit dans le Chapitre 1.5 (Fig. 3.1). Il sera aisé de les étendre aux dispositifs plus complexes dont nous voulons simuler le fonctionnement (plusieurs électrodes extractrices). Nous raisonnons pour commencer en coordonnées planes X = (x, y). Puisque nous devons également être à même de résoudre le problème \mathcal{P} sur des géométries axisymétriques, la mise en oeuvre des méthodes numériques en coordonnées cylindriques sera traitée.



FIGURE 3.1 – Domaine d'étude.

La frontière de Ω est définie par $\Gamma = \Gamma_p \cup \Gamma_d \cup \Gamma_n \cup \Gamma_s$. Le domaine Ω est symétrique, et on note Γ_0 la droite de symétrie (axe de symétrie si on est en coordonnées cylindriques).

Conditions aux limites

Nous ne reviendrons pas sur les conditions limites sur Γ_d , Γ_n et Γ_s qui ont été définies dans la Section 1.5. Rappelons simplement qu'elles sont de types Neumann ou Dirichlet (non homogène) pour le potentiel et réfléchissantes ou purement absorbantes pour les particules. Nous allons par contre nous attarder sur le choix de la position de la frontière Γ_p . On rappelle notamment les critères qui nous ont permis d'utiliser les résultats du Chapitre 2 (Section 2.5).

• Il faut avant tout être suffisamment loin de l'électrode extractrice pour que le champ transverse soit nul, soit

$$\left. \frac{\partial \Phi}{\partial y} \right|_{\Gamma_p} = 0,$$

afin de se ramener au cas monodimensionnel.

Nous voulons pouvoir injecter le long de Γ_p toutes les particules de façon équivalente. Pour cela, il faut que f_p soit constante sur Γ_p . Comme f_p est une fonction de Φ , il faut que le potentiel soit constant sur cette frontière.

Ces deux conditions impliquent que cette frontière doit être perpendiculaire à l'axe de propagation (0, x), et

$$\nabla \Phi(L_p, y) \propto \vec{\nu}_p$$

où $\vec{\nu}_p$ désigne toujours la normale extérieure à Γ_p , et L_p la position de Γ_p .

• Il n'est possible d'utiliser la fonction analytique $f_p^{\stackrel{r}{1D}}$ que si Γ_p est située dans la zone de validité de l'approximation quasi-neutre, c'est-à-dire si $L_p < a_{\gamma}$.

La position de Γ_p doit également tenir compte de contraintes supplémentaires :

• Comme il a été dit dans l'introduction, le comportement du faisceau que l'on veut obtenir dépend en partie des caractéristiques du plasma et de la gaine, les deux zones comprises entre la frontière d'injection et l'électrode plasma (Fig. 3.1). Il faut donc que la longueur $L_c - L_p$ soit suffisamment grande devant le pas d'espace Δx (dont le choix sera discuté dans la section suivante), de façon à ce que ces deux zones soient maillées assez finement et que l'approximation numérique y soit suffisamment précise.

• Inversement, il faut éviter que la frontière soit "trop" éloignée de l'électrode plasma, et ce pour une raison liée à la résolution numérique. On verra au cours de la discussion des résultats (Chapitre 4) que le nombre de particules par maille est élevé dans le plasma et dans la gaine. Par conséquent, le temps de calcul consacré à la résolution de Vlasov-Poisson sur ces deux zones est important. Il faut donc faire en sorte que le rapport $(L_c - L_p)/\Delta x$ ne soit pas trop grand. Pour respecter ces deux dernières contraintes, on retiendra comme critère que $L_c - L_p$ doit être de l'ordre de quelques dizaines de Δx .

Une fois L_p fixé en fonction de ces quatre contraintes, il ne reste plus qu'à appliquer les résultats obtenus dans le Chapitre 2 qui permettent de calculer Φ_p , puis la fonction de distribution analytique monodimensionnelle $f_p^{1D}(\Phi_p, V)$. Dès lors, les conditions limites sur la frontière d'injection sont

$$\begin{cases} \Phi|_{\Gamma_p} = \Phi_p \\ f|_{\Gamma_p}(x, y, v_x, v_y, t) = f_p^{1D}(\Phi_p, v_x), v_x > 0. \end{cases}$$

Conditions initiales

Le choix des conditions initiales n'est pas déterminant du moment que la solution stationnaire ne présente pas de particules piégées : le dispositif est étudié pour qu'il en soit ainsi On verra dans les résultats (Section 4.3) que pour différentes initialisations on obtient la même solution stationnaire au problème \mathcal{P} .

3.3 Description de la méthode PIC

3.3.1 Principe de la méthode et notations

Cette méthode est classiquement utilisée pour résoudre les problèmes de particules chargées soumises à des champs électro-magnétiques, et une littérature abondante existe sur ce sujet [3][23]. Nous en rappelons les principales caractéristiques en coordonnées planes.

Cette méthode repose sur une approximation particulaire de la fonction de distribution f solution de l'équation de Vlasov (3.1). Elle consiste à approcher la fonction de distribution f par une combinaison linéaire de masses de Dirac f^h dans l'espace des phases $\Pi = \Omega \times \mathbb{R}^2$:

$$f(X, V, t) \simeq f^h(X, V, t) \tag{3.2}$$

оù

$$f^{h}(X,V,t) = \sum_{i=1}^{I} p_{i}\delta(x - x_{i}(t))\delta(y - y_{i}(t))\delta(v_{x} - v_{xi}(t))\delta(v_{y} - v_{yi}(t)).$$

Terminologie : la fonction de distribution est approchée par I "particules" caractérisées au temps t par leur position

$$\xi_i = (x_i, y_i),$$

leur vitesse

$$V_i = (v_{xi}, v_{yi}),$$

et leur poids

 p_i ,

correspondant à un nombre de particules "réelles".

Remarque. L'approximation (3.2) se fait au sens des mesures. Il faut que, pour toute fonction test χ continue à support compact sur l'espace des phases Π ($\chi \in C_0^0(\Pi)$),

$$\langle f, \chi \rangle \simeq \langle f^h, \chi \rangle$$
.

Ici, $\langle ., . \rangle$ désigne la dualité entre $\mathcal{M}(\Pi)$ l'espace des mesures sur Π et $C_0^0(\Pi)$. En particulier, si une fonction g est localement intégrable sur Π ($g \in L^1_{loc}(\Pi)$), alors

$$\langle g, \chi \rangle = \int_{\Pi} g(s)\chi(s)ds.$$

Pour plus de détails, on renvoie le lecteur à [5] [41].■

Le domaine Ω est recouvert d'un maillage rectangulaire. Les différentes parties de la frontière Γ correspondent à des lignes de ce maillage. Une méthode de type PIC (Particle In Cell) est une méthode de pas à pas en temps. Au temps $t_n = n\Delta t$, on connaît

$$\left(\xi_i^n, V_i^{n-\frac{1}{2}}, p_i^n\right)$$

pour chaque particule, ainsi que

 Φ_h^n ,

une approximation discrète de Φ , solution de l'équation de Poisson (on utilise ici une méthode de différences finies).

On calcule alors la force F_i qui agit sur la particule *i* (modification de sa vitesse et de sa position), par interpolation du champ électrique déduit de Φ_h^n . La nouvelle répartition des particules à l'itération n + 1 permet de calculer la densité aux noeuds, et donc le second membre de l'équation de Poisson. On reproduit ainsi le couplage entre Vlasov et Poisson. Ce cycle est reproduit lors de l'itération suivante (Fig. 3.2).



FIGURE 3.2 – Cycle d'une méthode PIC sur une itération.

Avant de regarder plus en détail les différentes étapes du cycle , précisons quelques notations :

Les indices j et k sont liés à la discrétisation en espace dans les directions x et y. L'ordonnée des particules est mesurée à partir de l'axe de symétrie du dispositif, Γ_0 . Les pas d'espace dans les deux directions sont Δx et Δy .

On note

$$\Xi_{j,k} = (X_j, Y_k) = (L_p + j\Delta x, k\Delta y)$$

la position du nœud (j, k), et de manière générique

$$F_{j,k} = F(X_j, Y_k)$$

chacune des grandeurs F calculées en ce nœud.
3.3.2 Cycle sur une itération

1] Calcul du champ. Les composantes du champ électrique sont obtenues en calculant la dérivée du potentiel au centre des arêtes (Fig. 3.3) :

$$E_{j-1/2,k}^{x} = \frac{\Phi_{j,k} - \Phi_{j-1,k}}{\Delta x}, \\ E_{j,k-1/2}^{y} = \frac{\Phi_{j,k} - \Phi_{j,k-1}}{\Delta y}.$$

En centrant ainsi le calcul du champ, on a une méthode d'ordre 2 en espace [3].



FIGURE 3.3 – Calcul du champ électrique.

2] Calcul de F_i , force agissant sur la particule i

Cela revient à calculer E_i le champ "vu" par la particule *i*. Il se pose maintenant un problème inverse de celui qu'on a rencontré dans le calcul de la densité aux noeuds : nous disposons d'un champ constant par morceaux, et nous avons besoin d'une représentation continue de ce champ pour calculer la trajectoire des particules. Nous traitons séparément les composantes E^x et E^y du champ électrique.

• Si $\xi_i \in M_{j-1/2,k} = [X_{j-1/2}, X_{j+1/2}] \times [Y_k, Y_{k+1}]$, la composante axiale du champ vu par la particule *i* est interpolé linéairement à partir des composantes axiales du champ calculées en $\Xi_{j-1/2,k}, \Xi_{j+1/2,k}, \Xi_{j-1/2,k+1}, \Xi_{j+1/2,k+1}$.

En notant

$$S_{i,j,k}^x = S(\xi_i, \Xi_{j-1/2,k}),$$

on obtient

$$E_i^x = \left(S_{i,j,k}^x E_{j-1/2,k}^x + S_{i,j+1,k}^x E_{j+1/2,k}^x + S_{i,j,k+1}^x E_{j-1/2,k+1}^x + S_{i,j+1,k+1}^x E_{j+1/2,k+1}^x\right) \Delta x \Delta y.$$

• De même, si $\xi_i \in M_{j,k-1/2} = [X_j, X_{j+1}] \times [Y_{k-1/2}, Y_{k+1/2}]$, on calcule la composante transverse du champ en ξ_i à partir des composantes transverses du champ calculées en $\Xi_{j,k-1/2}, \Xi_{j,k+1/2}, \Xi_{j+1,k-1/2}, \Xi_{j+1,k+1/2}$. Si on note

$$S_{i,j,k}^y = S(\xi_i, \Xi_{j,k-1/2}),$$

on a maintenant

$$E_{i}^{y} = \left(S_{i,j,k}^{y}E_{j,k-1/2}^{y} + S_{i,j,k+1}^{y}E_{j,k+1/2}^{y} + S_{i,j+1,k}^{y}E_{j+1,k-1/2}^{y} + S_{i,j+1,k+1}^{y}E_{j+1,k+1/2}^{y}\right)\Delta x\Delta y.$$

3] Avancée des particules.

L'équation de Vlasov est discrétisée dans l'espace des phases (ξ, V) : les équations caractéristiques de cette équation sont données par

$$\begin{cases} \xi' = \xi + \int_{t}^{t'} V dt \\ V' = V + \int_{t}^{t'} \frac{1}{m_{i}} F dt. \end{cases}$$
(3.3)

La fonction f est constante le long des courbes caractéristiques définie par (3.3), soit

$$f(\xi', V', t') = f(\xi, V, t).$$

Le système caractéristique (3.3) est discrétisé en utilisant un schéma "saute-mouton" (ou "leapfrog") centré :

$$\begin{cases} V_i^{n+\frac{1}{2}} = V_i^{n-\frac{1}{2}} + \frac{F_i^n}{m_i} \Delta t \\ \xi_i^{n+1} = \xi_i^n + V_i^{n+\frac{1}{2}} \Delta t. \end{cases}$$
(3.4)

Ce schéma est consistant et d'ordre 2 en temps. Il est stable si Δt est suffisamment petit (voir section suivante, choix du pas de temps).

4]Traitement des conditions limites et des termes sources sur les particules, à savoir élimination des particules qui sont sorties du domaine, introduction des nouvelles particules soit par injection, soit par ionisation. Ces deux derniers points sont développés dans les Sections 3.4 et 3.5.

5] Calcul de la densité $\rho_{j,k}$ au noeud (j,k) par une méthode d'ordre 1.

Une approximation particulaire de la densité est donnée par ρ^h telle que :

$$\rho^{h}(X) = \int_{-\infty}^{\infty} f^{h}(X, V) dV = \sum_{i \in \Omega} p_{i} \delta(x - x_{i}) \delta(y - y_{i})$$
(3.5)

en utilisant l'approximation particulaire (3.2).

C'est une approximation de ρ au sens de

$$<
ho^h, \chi > \simeq <
ho, \chi >,$$
(3.6)

pour toute fonction $\chi \in C_0^0(\Omega)$.

Pour résoudre l'équation de Poisson par une méthode de différences finies, on a besoin de connaître la valeur de la densité aux nœuds, alors qu'on ne dispose que d'une approximation de ρ par des mesures, combinaisons linéaires de masses de Dirac.

Dans le cas d'une méthode PIC, la densité particulaire $\rho_{j,k}$ dépend du poids et de la position des particules situées dans les mailles dont le nœud (j,k) est un sommet. Ces

mailles sont au nombre de 4 pour un nœud intérieur à Ω ; il peut y en avoir de 1 à 3 pour un nœud situé sur la frontière Γ . On note $\Omega_{j,k}$ l'ensemble des mailles voisines de (j,k)(Fig. 3.3) et on définit les fonctions $\psi_{j,k}$ linéaires par morceaux sur Ω par

$$\psi_{j,k}(x,y) = \begin{cases} \left(1 - \frac{|x - X_j|}{\Delta x}\right) \left(1 - \frac{|y - Y_k|}{\Delta y}\right) & \text{si } (x,y) \in \Omega_{j,k} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}$$

Ces fonctions sont continues à support compact sur Ω . On peut donc écrire (3.6) avec $\chi = \psi_{j,k}$ de sorte que

$$< \rho^h, \psi_{j,k} > \simeq < \rho, \psi_{j,k} > .$$

La densité étant continue et bornée, $\rho \in L^1_{loc}(\Omega)$, de sorte que

$$<
ho,\psi_{j,k}>=\int_{\Omega}
ho\psi_{j,k}dxdy=\int_{\Omega_{j,k}}
ho\psi_{j,k}dxdy.$$

En approchant cette intégrale par une formule de quadrature,

$$\int_{\Omega_{j,k}} \rho \psi_{j,k} dx dy \simeq \rho_{j,k} \int_{\Omega_{j,k}} \psi_{j,k} dx dy,$$

on définit la densité au nœud par

$$\rho_{j,k} = \frac{\langle \rho^h, \psi_{j,k} \rangle}{\int_{\Omega_{j,k}} \psi_{j,k} dx dy}.$$

Or ρ^h est donnée par (3.5) si bien que

$$\langle \rho^h, \psi_{j,k} \rangle = \sum_{i \in \Omega} p_i \psi_{j,k}(\xi_i) = \sum_{i \in \Omega_{j,k}} p_i \psi_{j,k}(\xi_i)$$

Pour un nœud intérieur, on calcule

$$\int_{\Omega_{j,k}} \psi_{j,k} dx dy = \Delta x \Delta y.$$

On écrit alors la densité au noeud (j, k) intérieur sous la forme

$$\rho_{j,k} = \sum_{\xi_i \in \Omega_{j,k}} S(\xi_i, \Xi_{j,k}) p_i, \qquad \Omega_{j,k} = [X_{j-1}, X_{j+1}] \times [Y_{k-1}, Y_{k+1}]$$

avec

$$S(\xi_i, \Xi_{j,k}) = \frac{1}{\Delta x} \left(1 - \frac{|x_i - X_j|}{\Delta x} \right) \times \frac{1}{\Delta y} \left(1 - \frac{|y_i - Y_k|}{\Delta y} \right).$$

Dans le cas d'un noeud extérieur, il suffit de recalculer $\int_{\Omega_{j,k}} \psi_{j,k} dx dy$ avec $\Omega_{j,k}$ réduit à une, deux ou trois mailles suivant la position du noeud sur la frontière, ce qui donne une expression différente de $S(\xi_i, \Xi_{j,k})$.

Remarque. Nous avons également envisagé l'utilisation de méthodes d'ordre plus élevé que la méthode PIC, en prenant des fonctions ψ quadratiques ou même cubiques [8]. Toutefois, l'amélioration des résultats, tant en terme de précision que de limitation du bruit numérique, ne nous a pas semblé suffisante en regard du coût plus élevé de ces méthodes en temps de calcul.

6] Calcul du potentiel aux noeuds, $\Phi_{j,k}$, obtenu en résolvant l'équation de Poisson par une méthode que nous détaillerons dans la Section 3.6.

A ces six phases d'une itération en temps il convient d'ajouter la sortie des diagnostics désirés, ainsi que des traitements plus spécifiques, comme la coalescence des particules, qui permettent d'optimiser la méthode numérique. Nous reviendrons en détail sur cette technique dans la Section 3.7.

3.3.3 Choix des pas d'espace et de temps

Pas d'espace

Le choix du pas d'espace est induit par des considérations sur les échelles de longueurs caractéristiques du phénomène physique que l'on modélise. Il intervient dans la discrétisation de l'équation de Poisson. La longueur qui nous intéresse ici est la longueur d'onde des oscillations électrostatiques [23], qui est la longueur de Debye,

$$\lambda_D(\rho) = \sqrt{\frac{\varepsilon_0 k T_e}{\rho e^2}}.$$

La longueur de Debye est minimale pour les plus fortes densités du plasma, c'est-à-dire au centre du plasma ($\rho = n_0$). On choisit de prendre un pas d'espace du même ordre de grandeur, soit en dimensions réelles

$$\Delta x_{\rm dim} = \lambda_D(n_o),$$

ce qui s'écrit en grandeurs adimensionnées

$$\Delta x = \varepsilon.$$

Ce choix permet en outre d'avoir une bonne description de la gaine, dont la taille est de l'ordre de quelques longueurs de Debye [42].

Pas de temps

Le schéma "Saute-Mouton" utilisé pour l'avancement des particules est consistant, d'ordre 2 en temps, et stable si le pas de temps vérifie le critère

$$\omega \Delta t_{dim} < 2,$$

où ω est la plus grande fréquence caractéristique du problème [23]. Comme seuls les ions sont réellement traités et qu'il n'y a pas de champ magnétique, la seule fréquence à considérer est la pulsation plasma ionique

$$\omega_{pi} = \sqrt{\frac{\rho e^2}{\varepsilon_0 m_i}}$$

qui est maximale pour $\rho_{\max} = \max(\rho(X), X \in \Omega)$. Une focalisation très brutale du faisceau peut conduire localement, sur l'axe, à une densité particulaire supérieure à la densité du plasma neutre. Toutefois, pour des dispositifs correctement configurés, on a $\rho_{\max} = n_0$ et le critère s'écrit

$$\sqrt{\frac{n_0 e^2}{\varepsilon_0 m_i}} \Delta t_{dim} < 2$$

qui devient en grandeurs adimensionnées, avec $\omega_{pi} = \frac{v}{\lambda_D}$,

$$\Delta t < 2\varepsilon.$$

C'est la condition de stabilité relative aux oscillations plasma utilisée dans les méthodes particulaires.

Dans le problème que l'on cherche à résoudre, Δt doit en outre vérifier un critère lié à la discrétisation de l'injection des particules sur Γ_p . Cette contrainte s'avère plus stricte, et nous montrerons dans la section suivante qu'elle s'écrit

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{\sqrt{2\Phi_a}},$$

où Φ_a désigne la valeur maximale (et limite) du potentiel solution de l'équation plasma, calculé dans la Section 2.4.

3.4 Traitement de l'injection des particules

En L_p , le plasma a un comportement monodimensionnel dans la direction x et on impose que Γ_p soit perpendiculaire à cette direction. Cela se traduit par le fait que

1- les particules sont injectées de la même façon sur chacune des mailles adjacentes à $\Gamma_p.$

2- la vitesse des particules injectées est axiale :

$$v_{yi} = 0.$$

Pour simplifier, on note dans cette section $v = v_{xi}$.

Les particules sont injectées dans le domaine sur Γ_p suivant la fonction de distribution de l'approximation quasi-neutre calculée dans la Section 2.4 et donnée par la formule

$$f_p(y, v, t) = f_p^{1D}(\Phi_p, v) = \begin{cases} \frac{\sqrt{2}}{\pi} \left(\frac{1}{\sqrt{\Phi_p - \frac{v^2}{2}}} - 2D(\sqrt{\Phi_p - \frac{v^2}{2}}) \right) &, \ 0 < v < \sqrt{2\Phi_p} \\ 0, \ \text{sinon.} \end{cases}$$

Cette fonction est en fait invariante en y et en t. Elle est donc notée $f_p(v)$. On en déduit par intégration en v les densités de charge et de courant en L_p ,

$$\begin{cases} \rho_p = e^{-\Phi_p} \\ j_p = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} D(\sqrt{\Phi_p}). \end{cases}$$

3.4.1 Méthode d'injection classique

Calcul des vitesses

Soit la fonction normalisée

$$g(v) = \frac{f_p(v)}{\int_0^{+\infty} f_p(w)dw} = \frac{f_p(v)}{\rho_p}$$

On en cherche une approximation sur κ particules en tout point de Γ_i et à chaque instant sous la forme

$$g^{h}(v) = \sum_{i=1}^{\kappa} \alpha_{i} \delta(v - v_{i}), \, \kappa \in \mathbb{N}^{*}.$$
(3.7)

Définissons la fonction G de $]0,+\infty[$ sur [0,1] par

$$G(v) = \int_0^v g(w) dw$$

et posons

$$I = \int_0^{+\infty} g(v)\chi(v)dv,$$

où χ est une fonction continue à support compact. En faisant le changement de variable w = G(v), on a

$$I = \int_0^{+\infty} \chi(v) G'(v) dv = \int_0^1 \chi(G^{-1}(w)) dw$$

Une formule de quadrature permet d'écrire, pour $\kappa \in \mathbb{N}^*$,

$$I \simeq \frac{1}{\kappa} \sum_{i=1}^{\kappa} \chi\left(G^{-1}\left(\frac{i-\frac{1}{2}}{\kappa}\right)\right)$$
$$\simeq \frac{1}{\kappa} \sum_{i=1}^{\kappa} \chi(v_i),$$

en notant

$$v_i = G^{-1} \left(\frac{i - \frac{1}{2}}{\kappa} \right). \tag{3.8}$$

Ainsi, une approximation de la distribution normalisée s'écrit

$$g^{h}(v) = \frac{1}{\kappa} \sum_{i=1}^{\kappa} \delta(v - v_i),$$

de sorte que dans (3.7) $\alpha_i = \frac{1}{\kappa}$ pour tout *i*.

On vérifie bien que

$$\int_0^\infty g^h(v)dv = \frac{1}{\kappa}\sum_{i=1}^\kappa 1 = 1 \stackrel{def}{=} \int_0^\infty g(v)dv$$

Pour calculer la vitesse des κ particules qui approchent g, on utilise la relation (3.8). Comme il n'est pas possible d'obtenir une expression analytique de la fonction G^{-1} , les vitesses sont calculées numériquement par interpolation entre des valeurs tabulées de $G:[0, v_{\max}] \rightarrow [0, 1]$, où $v_{\max} = \sqrt{2\Phi_p}$ majore les vitesses d'injection. C'est possible dans la mesure où G est strictement croissante sur $[0, +\infty[$, puisque f_p l'est.

On représente sur la Figure 3.4 G(v) sur $[0, v_{\text{max}}]$, pour $\Phi_p = 0, 17187$ et donc $v_{max} = 0, 5863$.



FIGURE 3.4 – Intégrale normalisée de la fonction de distribution.

Comme l'injection est invariante en y et en t, on décrit l'injection de η particules sur la maille $M_{0,k} = [0, \Delta x] \times [k\Delta y, (k+1)\Delta y]$ et sur un pas de temps. Les résultats obtenus sont ensuite appliqués sur toutes les mailles frontière à chaque itération.

Les vitesses des particules injectées sont calculées en prenant $\kappa = \eta$.

Poids des particules entrantes

Nous choisissons d'injecter toutes les particules avec le même poids, calculé à partir de la charge qui entre dans la maille $M_{0,k}$ pendant un temps Δt . Cette charge est égale à

$$\int_{k\Delta y}^{(k+1)\Delta y} \int_{t}^{t+\Delta t} \int_{0}^{+\infty} f_{p}(v) v \, dv \, dt \, dy,$$

ou, comme f_p est invariante en y et en t,

$$\Delta t \Delta y \int_0^{+\infty} f_p(v) v \, dv = \Delta t \Delta y j_p.$$

Le poids p_i de chaque particule entrante est donc

$$p_i = \frac{j_p \Delta t \Delta y}{\eta} = \frac{2\sqrt{2}D(\sqrt{\Phi_p})}{\pi \eta} \Delta t \Delta y.$$

Position des particules

La position (x_i, y_i) des particules doit permettre d'approcher une injection qui se fait de façon équiprobable sur toute la frontière Γ_p et continue en temps. Ces deux contraintes sont traitées respectivement par le choix de l'ordonnée et de l'abscisse des particules injectées.

Une injection sans précaution telle que celle qui est représentée sur la Figure 3.5-*a* (particules toutes injectées sur la frontière, même répartition régulière en espace et en vitesse) peut se traduire par l'apparitions d'artefacts numériques au cours de la simulation (regroupements en "paquets" de particules de même vitesse, ...) qui induisent une mauvaise interprétation physique des résultats.



FIGURE 3.5 – Position initiale des particules injectées ($\eta = 5$).

Dans notre procédure d'injection, l'ordonnée des η particules est calculée de manière aléatoire entre $k\Delta y$ et $(k + 1)\Delta y$ (Fig. 3.5-b). On attribue ensuite à chacune de ces particules une des η vitesses précédemment calculées.

Le choix de l'abscisse de la particule doit permettre de simuler une injection continue en temps. Les particules injectées au temps discret t^n , transportent la charge qui est effectivement entrée dans le domaine entre les temps $(n-1)\Delta t$ et $n\Delta t$. Connaissant la vitesse d'injection v_i d'une particule, nous traduisons cela en plaçant la particule en

$$x_i = L_p + \beta_i v_i \Delta t,$$

où β_i est un nombre tiré aléatoirement entre 0 et 1.

Cela revient à dire que la particule a été réellement injectée à l'instant

$$(n-1)\Delta t + (1-\beta_i)\Delta t$$

en L_p , et donc qu'elle a parcouru la distance $\beta_i v_i \Delta t$ avant le temps $n\Delta t$ où l'injection est effectuée numériquement.

Remarque. Conséquence sur le choix du pas de temps.

Il convient de s'assurer que les particules ne sont injectées que dans la première maille (dans la direction longitudinale), de façon à contrôler la densité projetée sur Γ_i . Comme les vitesses d'injection sont majorées par v_{max} , il convient que

$$v_{\max}\Delta t = \sqrt{2\Phi_p}\Delta t < \Delta x$$

Puisque la frontière d'injection est placée dans la zone de validité de l'approximation quasi-neutre, Φ_p est inférieur à Φ_a . Il suffit donc que

$$\Delta t < \frac{\Delta x}{\sqrt{2\Phi_a}} = \frac{\Delta x}{1.31}$$

pour que cette contrainte soit respectée.

Cette façon de calculer poids et vitesses des particules injectées ne pose pas de problème avec des distributions plus classiques (maxwellienne). Par contre, dans notre situation, certaines particules ont des vitesses initiales trop faibles, et s'accumulent dans les premières mailles. Cette situation est amplifiée par le fait que le champ est faible au niveau de la frontière d'injection, et accélère peu les particules. Cela se traduit par une surestimation de la densité à l'origine (voir Figure 4.3 p. 111).

Une méthode d'injection à poids variable [35] a également été testée. Au lieu d'injecter des particules de poids constant et de calculer ensuite les vitesses, on considère une distribution régulière de vitesses et on déduit de la vitesse v_i le poids de la $i^{\acute{e}me}$ particule injectée, proportionnel à $f_p(v_i)$. Cette méthode donne de bons résultats avec une distribution maxwellienne, mais est difficilement applicable dans notre cas. En effet, plus la discrétisation en vitesse est fine plus les particules rapides ont des vitesses v'_i proches de v_{max} . Or f_p présente une asymptote en v_{max} . On a donc $f_p(v'_i) \to +\infty$ et les poids de ces particules rapides tendent vers l'infini! D'autre part, même si on limite le nombre de particules injectées pour faire en sorte que les poids des particules ne soient pas trop importants, le fait d'avoir des particules de poids trop différents n'est pas compatible avec la méthode de coalescence que nous avons choisi de mettre en œuvre (Section 3.7).

Nous allons décrire dans la section suivante une technique plus adaptée à notre problème.

3.4.2 Correction de l'injection : suppression des particules lentes.

L'idée est de ne pas émettre les particules de vitesse trop lente : une vitesse minimale v_{min} est fixée.

On commence par calculer avec la méthode classique les vitesses des η particules injectées. On note $\bar{\eta}$ le nombre de particules qui ont une vitesse supérieure à v_{min} . On considère donc qu'il n'y a plus que $\bar{\eta}$ particules injectées.

On introduit l'approximation de la fonction de distribution normalisée $\bar{g}^h(v)$ définie par

$$\bar{g}^h(v) = \gamma \, g^h(v) \, Y(v - v_{\min}),$$

où Y est la fonction de Heaviside, et γ un coefficient de normalisation que l'on doit calculer de façon à ce que

$$\int_0^{+\infty} \bar{g}^h(v)dv = \int_0^{+\infty} g^h(v)dv = 1$$

On a

$$\int_{0}^{+\infty} \bar{g}^{h}(v) dv = \gamma \int_{0}^{+\infty} g^{h}(v) Y(v - v_{\min}) dv$$
$$= \gamma \sum_{i=1}^{\eta} \frac{1}{\eta} Y(v_{i} - v_{\min})$$
$$= \gamma \sum_{i=1}^{\bar{\eta}} \frac{1}{\eta}.$$

Par conséquent,

$$\int_0^{+\infty} \bar{g}^h(v) dv = 1 \iff \gamma = \frac{\eta}{\bar{\eta}},$$

de sorte que

$$\bar{g}_p^h(v) = \begin{cases} \frac{1}{\bar{\eta}} \sum_{i=1}^{\bar{\eta}} \delta(v - v_i) \text{ pour } v_{\min} < v < v_{\max} \\ 0 \text{ sinon} \end{cases}$$

Pour déterminer les vitesses d'injection, on procède comme dans la section précédente. On définit la fonction \overline{G} par

$$\bar{G}(v) = \int_0^v \frac{\eta}{\bar{\eta}} g(w) dw$$

et on calcule

$$\bar{v}_i = \bar{G}^{-1} \left(\frac{i - \frac{1}{2}}{\bar{\eta}} \right) \quad , \ i = 1, ..., \bar{\eta}.$$

Il ne reste qu'à choisir la vitesse minimale. On pose de manière arbitraire

$$v_{\min} = \frac{\langle v \rangle}{2},$$

où $\langle v \rangle$ est la vitesse moyenne des η particules injectées avant limitation.

Dans le cas illustré par la Figure 3.4, ($\Phi_p = 0.17187$), si $\eta = 100$, alors $\langle v \rangle = 0,3958$. Le critère choisi conduit à $\bar{\eta} = 82$. Cela revient à supprimer environ 20% des particules. Nous vérifierons sur un résultats numérique la validité de cette technique (Section 4.2).

La charge $j_p \Delta t \Delta y$ injectée sur un pas de temps dans la maille ne change pas. Elle est maintenant répartie uniformément sur $\bar{\eta}$ particules dont le poids est

$$\bar{p}_i = \frac{j_p \Delta t \Delta y}{\bar{\eta}}.$$

La position initiale des particules est déterminée de la même façon que lors de l'injection classique. Les abscisses sont calculées à partir des vitesses \bar{v}_i .

3.5 Traitement de l'ionisation

On décrit maintenant la discrétisation du terme source, $s(n_e)\delta(v)$, avec $s(n_e(X)) = \sqrt{2}e^{-\gamma\Phi(X)}$. A chaque pas de temps, l'ionisation consiste à rajouter dans le domaine des particules dont le poids est calculé à partir du taux d'ionisation.

Ces particules sont créées aux noeuds intérieurs, c'est-à-dire que la particule i est créée à la position

$$(x_i, y_i) = (X_j, Y_k).$$

L'ionisation se faisant à vitesse nulle (Section 1.2.3), la vitesse de la particule i est

$$(v_{xi}, v_{yi}) = (0, 0).$$

Son poids est donné par

$$p(x_i) = \int_t^{t+\Delta t} \int_{X_{j-1/2}}^{X_{j+1/2}} \int_{Y_{k-1/2}}^{Y_{k+1/2}} s(n_e) dy dx dt = \sqrt{2} \int_t^{t+\Delta t} \int_{X_{j-1/2}}^{X_{j+1/2}} \int_{Y_{k-1/2}}^{Y_{k+1/2}} e^{-\gamma \Phi(x)} dx dt,$$

et après approximation

$$p_i = \sqrt{2}e^{-\gamma\Phi_{j,k}}\Delta t\Delta x\Delta y.$$

Pour que cette approximation soit valable, il faut que le potentiel ne varie pas trop au voisinage de $\Xi_{j,k} = (X_{j,}X_{k})$. Il faut donc que le maillage soit suffisamment fin, surtout dans la gaine où les gradients de potentiel sont importants dans la direction axiale. Cette condition est respectée si on prend un pas d'espace de l'ordre de la longueur de Debye.

Remarques.

1- Physiquement, l'ionisation ne se produit que dans le plasma et la gaine. On ne crée donc des particules que sur les noeuds $\Xi_{j,k}$ tels que $X_j < L_c$. Dans le cas où $\gamma = 1$ ou 2, l'ionisation dépend du potentiel et est d'autant plus faible qu'il augmente, ce qui pourrait conduire à créer, même dans la gaine, des particules de poids si faible qu'elles n'auraient aucune influence, mais dont la présence alourdirait les calculs. Il faut donc se fixer un poids minimum ; ce poids seuil correspond à une fraction du poids des particules injectées, par exemple 1%.

2- Des simulations montrent qu'on peut indifféremment introduire les particules aux noeuds ou au centre des mailles. Répartir le poids sur plusieurs particules n'améliore le résultat final que dans la mesure où le nombre total de particules est plus grand.

3- Quand la frontière d'injection est éloignée de l'électrode plasma (donc proche du "centre du plasma" où $\Phi = 0$), le potentiel est faible près de Γ_p . On crée alors par ionisation des particules dont le poids est proche de celui des particules injectées. On a constaté dans ce cas une augmentation notable du bruit numérique.

3.6 Résolution de l'équation de Poisson

Au temps $t^n = n\Delta t$, on connaît Φ^{n-1} le potentiel calculé au temps précédent et ρ^n . On doit trouver Φ^n solution de l'équation de Poisson, elliptique non linéaire :

$$\Delta \Phi^{n}(x,y) = \frac{1}{\varepsilon^{2}} (\rho^{n}(x,y) - e^{-\Phi^{n}(x,y)}).$$
(3.9)

Nous allons discrétiser cette équation par une méthode de différences finies et aboutir ainsi à un système non linéaire. La solution de ce système sera déterminée en faisant converger une méthode itérative (méthode de Newton). A chaque itération de cet algorithme, nous serons amenés à résoudre un système linéaire. A cette fin, nous utiliserons un algorithme de Cholesky ou un algorithme de gradient conjugué préconditionné selon que l'étude est monodimensionnelle ou bidimensionnelle.



FIGURE 3.6 – Maillage de $\overline{\Omega}$.

Nous détaillons tout d'abord le maillage sur lequel s'effectue la discrétisation de l'équation de Poisson. Notons $\overline{\Omega}$ le rectangle circonscrit au domaine Ω , c'est-à-dire que $\overline{\Omega}$ contient Ω et l'électrode plasma (Fig. 3.6). C'est ce domaine qui est effectivement maillé. On ne considère que les nœuds intérieurs à Ω (les nœuds situés sur le plan de symétrie de Ω sont assimilés à des nœuds intérieurs). Les nœuds sont numérotés ligne par ligne, de k = 0 à k = K et de j = 1à j = J.

Les nœuds (j, k) pour j compris entre j_1 et j_2 et $k \ge k_1$ (représentés par des \blacksquare sur la Figure 3.6) se trouvent sur l'électrode. Ils ont été inclus au domaine pour simplifier la numérotation des nœuds et la forme des matrices. Le potentiel y étant connu (égal à Φ_c), leur présence n'implique pas de calculs supplémentaires. Ces noeuds étant peu nombreux par rapport aux noeuds de Ω (représentés par des \bullet), le surcroît de place mémoire qu'ils induisent ne prête pas à conséquence.

Remarque. Dans ce qui suit, nous ne détaillerons pas le traitement des conditions limites. Elles sont de type Dirichlet et Neumann, et que la prise en compte de telles conditions est classique et ne diffère pas de ce qui se fait pour résoudre l'équation de Laplace.

3.6.1 Discrétisation et linéarisation

La discrétisation spatiale de l'équation (3.9) donne

$$\frac{\Phi_{j+1,k}^n - 2\Phi_{j,k}^n + \Phi_{j-1,k}^n}{\Delta x^2} + \frac{\Phi_{j,k+1}^n - 2\Phi_{j,k}^n + \Phi_{j,k-1}^n}{\Delta y^2} = \frac{1}{\varepsilon^2} (\rho_{j,k}^n - e^{-\Phi_{j,k}^n})$$

pour j compris entre 1 et J et k compris entre 0 et K. Nous définissons le vecteur $g(\Phi)$ de dimension N = J(K+1) par

$$g_{kJ+j}(\Phi) = -\Delta y^2 (\Phi_{j+1,k}^n - 2\Phi_{j,k}^n + \Phi_{j-1,k}^n) - \Delta x^2 (\Phi_{j,k+1}^n - 2\Phi_{j,k}^n + \Phi_{j,k-1}^n) + \left(\frac{\Delta x \Delta y}{\varepsilon}\right)^2 (\rho_{j,k}^n - e^{-\Phi_{j,k}^n}).$$

La discrétisation de l'équation de Poisson nous conduit donc à résoudre le système de N équations non linéaires,

$$g(\Phi) = 0.$$

Pour linéariser ce système, on utilise une méthode itérative de Newton.

Algorithme de Newton :

On l'initialise en posant

$$\varphi_{kJ+j}^0 = \Phi_{j,k}^{n-1}$$

Notons φ^m la valeur du potentiel (rangé dans un vecteur de taille N) à l'itération m de l'algorithme. La méthode de Newton est issue d'un développement à l'ordre 1 de g et consiste à écrire que

$$g(\varphi^m) + g'(\varphi^m) \left(\varphi^{m+1} - \varphi^m\right) = 0,$$

où $g'(\varphi^m)$ est la matrice jacobienne définie par

$$[g'(\varphi)]_{\mu\nu} = \left[\frac{\partial g_{\mu}}{\partial \varphi_{\nu}}\right]_{\mu,\nu}.$$

C'est une matrice de dimension $N \times N$, symétrique et pentadiagonale qui s'écrit

$$g'(\varphi^m) = \begin{pmatrix} A_0 & B_1 & 0 & \cdots & 0 \\ B_0 & A_1 & B_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & B_K \\ 0 & \cdots & 0 & B_{K-1} & A_K \end{pmatrix}.$$
 (3.10)

Les A_k sont des matrices de taille $J \times J$

$$A_{k} = \begin{pmatrix} a_{1}^{k} & -\Delta y^{2} & 0 & \cdots & 0 \\ -\Delta y^{2} & a_{2}^{k} & -\Delta y^{2} & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & -\Delta y^{2} \\ 0 & \cdots & 0 & -\Delta y^{2} & a_{J}^{k} \end{pmatrix},$$

avec

$$a_j^k = 2(\Delta x^2 + \Delta y^2) + \left(\frac{\Delta x \Delta y}{\varepsilon}\right)^2 e^{-\varphi_{kJ+j}^m}.$$

Les B_k sont des matrices diagonales de taille $J \times J$, identiques entre elles :

$$B_k = \begin{pmatrix} -\Delta x^2 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -\Delta x^2 \end{pmatrix}$$

La matrice (3.10) diffère de la matrice du Laplacien par les termes diagonaux a_j^k . Le terme provenant de la non linéarité, $\left(\frac{\Delta x \Delta y}{\varepsilon}\right)^2 e^{-\varphi_{kJ+j}^m}$, est positif et renforce la diagonale. On montre aisément que la jacobienne est à diagonale strictement dominante et symétrique : elle est donc définie positive¹.

Nous sommes maintenant amenés à résoudre à chaque itération de l'algorithme de Newton le système *linéaire*

$$g'(\varphi^m)(\varphi^m - \varphi^{m+1}) = g(\varphi^m). \tag{3.11}$$

Nous itérons ce procédé jusqu'à ce que l'algorithme ait convergé, c'est-à-dire que l'erreur relative $|\varphi^{m+1} - \varphi^m|/|\varphi^m|$ soit inférieure à une valeur donnée. On a alors

$$\Phi_{j,k}^n = \varphi_{kJ+j}^{m+1}.$$

Remarque. On peut facilement constater que les procédures de discrétisation et de linéarisation sont ici commutatives.

^{1.} Nous avons vérifié que la prise en compte des conditions limites ne modifie pas les propriétés de cette matrice.

3.6.2 Résolution du système linéaire

A chaque itération de l'algorithme de Newton, on doit trouver $x = \varphi^m - \varphi^{m+1}$ solution du système linéaire (3.11) que nous écrivons sous la forme générique

$$Ax = b,$$

avec $A = g'(\varphi^m)$ et $b = g(\varphi^m)$.

La matrice A, de taille $N \times N$ (N = J(K + 1)), est symétrique, définie positive et creuse (penta-diagonale). On peut utiliser une factorisation régulière de Cholesky [46],

$$A = LL^t,$$

où L une matrice triangulaire inférieure dont les éléments sont classiquement définis par

$$l_{jj} = \sqrt{a_{jj} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}},$$

$$l_{ij} = (a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}) / l_{jj} \text{ pour } i \ge j+1.$$
(3.12)

La résolution du système linéaire est rapide et on obtient la solution exacte. Couplé à cette méthode, l'algorithme de linéarisation converge en quelques itérations. C'est cette procédure qui a été utilisée pour obtenir les résultats de validation en une dimension qui seront présentés dans le Chapitre 4.

Pour des dimensions supérieures, la méthode de Cholesky n'est plus adaptée, car elle est très coûteuse en place mémoire; en effet, la factorisation à la mauvaise propriété de "remplir" le profil de la matrice, creuse à l'origine. Il est possible d'estimer le surcoût induit. Avant tout, introduisons la définition suivante :

Definition 11

Soit A une matrice symétrique. Notons j_i le premier élément non nul de la ligne i de la matrice A. On appelle profil de A l'ensemble des éléments (i, j) de la matrice tels que $j_i \leq j \leq i$. On dit que ce profil est complet si $a_{i,j} \neq 0 \ \forall j \geq j_i$.

Estimons tout d'abord le nombre d'éléments non nuls de A. En reprenant les notations utilisées dans la section précédente, chacun des (K + 1) blocs diagonaux A_j contient J + 2(J - 1) éléments non nuls, tandis que les $2 \times K$ blocs extra-diagonaux comptent Jéléments non nuls. Au total, il y a donc 5JK + 3J - 2K - 2 éléments non nuls dans Adont le profil est représenté sur la Figure 3.7-a, toujours aux conditions limites près.

Construisons maintenant la matrice L: en utilisant l'algorithme (3.12) on constate que le profil de L est identique à celui de A, mais il est complet (Fig. 3.7-b). La matrice L contient $2J^2K + J^2 + J$ éléments non nuls.

La factorisation fait donc passer d'une matrice dont le nombre d'éléments non nuls est de l'ordre de JK à une matrice qui en compte de l'ordre de J^2K (par exemple,pour J = 500 et K = 30, on passe donc de 75.000 à 15.500.000 éléments non nuls). Or la place mémoire est un réel problème, à cause des centaines de milliers (voire de millions) de



FIGURE 3.7 – Profil des matrices A (a) et L (b).

particules qu'il faut gérer, et un tel surcoût est à proscrire.

Il a donc été préféré à cette résolution directe une méthode de gradient conjugué préconditionné, moins exigeante en mémoire. Rappelons en l'algorithme (itératif), en notant C une matrice de préconditionnement à définir. On initialise en posant

$$x_0 = \varphi^m \operatorname{donn\acute{e}}, r_0 = b - Ax_0, Cp_0 = r_0, z_0 = p_0.$$

Pour $k \ge 0$ (ici k désigne l'itération du gradient conjugué), on calcule

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \frac{(r_k | z_k)}{(A p_k | p_k)}, \\ x_{k+1} &= x_k + \alpha_k p_k, \\ r_{k+1} &= r_k - \alpha_k A p_k, \\ C z_{k+1} &= r_{k+1}, \\ \beta_{k+1} &= \frac{(r_{k+1} | z_{k+1})}{(r_k | r_k)}, \\ p_{k+1} &= z_{k+1} + \beta_{k+1} p_k. \end{aligned}$$

Cet algorithme est itéré jusqu'à ce que le résidu r_k soit inférieur à une valeur donnée.

Pour accélérer la convergence, on utilise un préconditionnement SSOR d'Evans ce qui revient à définir ainsi la matrice C :

On décompose A en $A = D - E - E^t$, en introduisant D la diagonale de A, et E la matrice triangulaire inférieure. On pose alors

$$C = TT^t$$

avec

$$T = \frac{(D - \omega E)D^{-\frac{1}{2}}}{\sqrt{\omega(2 - \omega)}}.$$

Dans l'expression de T, ω est un paramètre de relaxation. Dans [46], on propose $\omega = 1,77686$ comme paramètre optimal pour le Laplacien. Nous avons retenu cette valeur.

Rappelons que A est une matrice creuse. D'une part cela permet de simplifier le calcul des produits matrice-vecteur, et donc de rendre cette méthode moins coûteuse en temps de calcul. D'autre part, C est également une matrice creuse : le calcul de z_{k+1} , donné par $z_{k+1} = C^{-1}r_{k+1}$, peut se faire sans avoir à inverser C de manière explicite.

Remarque. On peut aussi préconditionner par la diagonale, c'est-à-dire poser C = D. Le calcul de $z_{k+1} = D^{-1}r_{k+1}$ demande moins de calculs à chaque itération de l'algorithme, mais il faut beaucoup plus d'itérations qu'avec le préconditionnement d'Evans pour converger, ce qui nous a fait opter pour ce dernier.

Toujours dans le but de gérer le problème de taille mémoire, nous allons maintenant présenter une technique numérique permettant de réduire le nombre de particules à traiter.

3.7 Coalescence des particules

Dans le domaine de calcul Ω , nous trouvons à la fois des particules qui sont injectées en permanence en Γ_p , et les particules créées à chaque itération par ionisation dans le plasma et la gaine. Cela représente un très grand nombre de particules, nombre qui en général atteint un maximum pendant la phase transitoire puis décroît lorsque l'on tend vers le régime stationnaire. Le traitement d'un si grand nombre d'inconnues (poids, vitesses, positions des particules) est pénalisant, aussi bien en terme de temps de calcul que de capacité mémoire. Le but de cette section est de présenter une technique qui permet de diminuer le nombre de particules contenues dans Ω sans affecter la précision de l'approximation de la fonction de distribution.

Pour cela, nous nous inspirons de [24] : dans cet article, les auteurs s'intéressent à la résolution de l'équation de Boltzmann homogène en espace, de la forme

$$\begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t}(t,v) = F(t,v)\\ f(0,v) = f_0(v). \end{cases}$$

Ils résolvent cette équation dans l'espace des vitesses \mathbb{R}^3 par une méthode qui consiste à créer à chaque itération en temps un grand nombre de couples $(p_i, v_i), p_i \in \mathbb{R}$. Pour que cet algorithme soit applicable, il leur faut réduire le nombre de couples. La réduction qu'ils proposent consiste à réduire ce nombre de N à deux tout en conservant la masse, la quantité de mouvement et la quantité d'énergie.

Nous allons appliquer cette méthode à notre problème : on considère N particules (particules initiales) dans une maille, $N \geq 3$. Elles sont caractérisées par leur position $\xi_i = (x_i, y_i)$, leur vecteur vitesse $v_i = (v_{xi}, v_{yi})$, et leur poids p_i . On les réduit en deux particules (particules résultantes), $(\tilde{x}_1, \tilde{v}_1, \tilde{p}_1)$ et $(\tilde{x}_2, \tilde{v}_2, \tilde{p}_2)$. Le choix des poids et des

vitesses permet de conserver les trois premiers moments sur les particules. Il est également nécessaire de conserver la densité calculée aux noeuds par projection des poids des particules². C'est en choisissant la position des particules résultantes que nous pouvons contrôler la projection de leur poids sur les noeuds.

Remarque. Il est connu que les méthodes particulaires se caractérisent par un 'bruit' numérique qui peut être important s'il n'y a pas suffisamment de particules par maille. Ce bruit se révèle plus important si des particules ont localement des poids trop différents. Il est nécessaire de tenir compte de ces éléments lors de la mise en oeuvre d'une technique de coalescence.

3.7.1 Conservation des moments sur les particules

Nous définissons pour commencer le poids des N particules, leur quantité de mouvement et leur énergie,

$$\begin{cases} p = \sum_{i=1}^{N} p_i \\ pv = \sum_{i=1}^{N} p_i v_i \\ pe = \sum_{i=1}^{N} p_i |v_i|^2 \end{cases}$$

Nous en déduisons leur vitesse moyenne

$$v = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{N} p_i v_i$$

et leur énergie moyenne

$$e = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{N} p_i |v_i|^2$$

Les poids et vitesses des deux particules résultantes doivent vérifier

$$\begin{cases} \tilde{p}_1 + \tilde{p}_2 = p \\ \tilde{p}_1 \tilde{v}_1 + \tilde{p}_2 \tilde{v}_2 = pv \\ \tilde{p}_1 |\tilde{v}_1|^2 + \tilde{p}_2 |\tilde{v}_2|^2 = pe. \end{cases}$$
(3.13)

Avant de les déterminer, démontrons le lemme suivant :

Lemme 12

Etant donné N couples $(p_i, v_i) \in \mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}^3$, $1 \leq i \leq N$ vérifiant $v_i \neq v_j$ pour $i \neq j$, on a

$$E = e - |v|^{2} = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{N} p_{i} |v_{i}|^{2} - \left| \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{N} p_{i} v_{i} \right|^{2} > 0.$$

^{2.} Dans le cas de la résolution de Vlasov-*Maxwell*, il faudrait également conserver la densité de courant aux noeuds.

Preuve :

$$p^{2}E = \sum_{i} \left(p_{i}^{2} |v_{i}|^{2} \right) + \sum_{i} \left(p_{i} \sum_{j \neq i} p_{j} |v_{j}|^{2} \right) - \left| \sum_{i} \left(p_{i} v_{i} \right) \right|^{2}$$

Or

$$\sum_{i} \left(p_{i} \left(\sum_{j \neq i} p_{j} |v_{j}|^{2} \right) \right) = \sum_{i} \left(p_{i} \sum_{j < i} p_{j} |v_{j}|^{2} \right) + \sum_{i} \left(p_{i} \sum_{j > i} p_{j} |v_{j}|^{2} \right)$$
$$= \sum_{i} \sum_{j < i} p_{i} p_{j} |v_{j}|^{2} + \sum_{j} \sum_{i > j} p_{j} p_{i} |v_{i}|^{2}$$
$$= \sum_{i,j < i} p_{i} p_{j} \left(|v_{i}|^{2} + |v_{j}|^{2} \right)$$

 et

$$\left|\sum_{i} (p_{i}v_{i})\right|^{2} = \sum_{i} (p_{i}^{2} |v_{i}|^{2}) + 2\sum_{i,j < i} p_{i}p_{j}(v_{i}, v_{j})$$

où (v_i, v_j) est le produit scalaire de ces deux vecteurs. Il en découle que

$$E = \frac{1}{p^2} \left(\sum_{i,j < i} p_i p_j \left(|v_i|^2 + |v_j|^2 \right) - 2 \sum_{i,j < i} p_i p_j (v_i, v_j) \right)$$
$$= \frac{1}{p^2} \sum_{i,j < i} p_i p_j |v_i - v_j|^2 > 0,$$

ce qui est bien le résultat annoncé.■

Revenons aux caractéristiques des particules résultantes. Leurs vitesses sont calculées par rapport à la vitesse moyenne : on introduit deux réels α_1 et α_2 tels que

$$\begin{cases} \tilde{v}_1 = v - \alpha_1 V\\ \tilde{v}_2 = v + \alpha_2 V, \end{cases}$$
(3.14)

où V est un vecteur quelconque vérifiant |V| = 1. Le système (3.13) devient

$$\begin{cases} \tilde{p}_1 + \tilde{p}_2 = p \\ \tilde{p}_1 \alpha_1 - \tilde{p}_2 \alpha_2 = 0 \\ \tilde{p}_1 \alpha_1^2 + \tilde{p}_2 \alpha_2^2 = p(e - |v|^2) \end{cases}$$

Nous avons trois équations et quatre inconnues. Comme il est préférable de ne pas accroître les différences de poids entre particules (cf remarque page 85), nous choisissons $\tilde{p}_1 = \tilde{p}_2$. Ce choix impose de prendre

$$\alpha_1 = \alpha_2$$

et donc

$$\begin{cases} \tilde{p}_1 = \tilde{p}_2 = \frac{p}{2} \\ \alpha_1 = \alpha_2 = \sqrt{e - |v|^2}. \end{cases}$$
(3.15)

avec $e - |v|^2 > 0$ d'après le Lemme 12.

Nous disposons alors du poids des particules résultantes ainsi que de leurs vitesses, après avoir choisi arbitrairement un V unitaire. Il reste à déterminer la position des deux particules après réduction. Pour cela, nous allons distinguer la coalescence en une dimension d'espace de la coalescence en deux dimensions.

3.7.2 Cas monodimensionnel

Conservation de la densité aux nœuds

Soit N particules contenues dans la maille $M_j = [j, j + 1]$. Elles contribuent aux densités aux nœuds j et j + 1, et nous notons ρ_j^d et ρ_{j+1}^g leurs contributions respectives sur ces deux nœuds, obtenues par projection (on a $\rho_j = \rho_j^d + \rho_j^g$). On veut que les deux particules issues de la coalescence des N particules vérifient les deux conditions suivantes :

- 1. elles demeurent dans la maille M_j . Cette condition permet d'effectuer la coalescence maille par maille ;
- 2. les contributions de ces deux particules aux densités sur les noeuds j et j+1 restent respectivement égales à ρ_j^d et ρ_{j+1}^g .

Proposition 13 Soit $x = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{N} p_i x_i$ le barycentre des particules initiales, et β un réel positif vérifiant $\beta < \min(X_{j+1} - x, x - X_j)$.

Si les positions des particules résultantes sont données par

$$\begin{cases} \tilde{x}_1 = x + \beta \\ \tilde{x}_2 = x - \beta, \end{cases}$$
(3.16)

alors les conditions 1 et 2 sont vérifiées.

Preuve.

• Sur le nœud j, on a

$$\rho_j^d = \sum_{i=1}^{i=N} \psi_{i,j} \frac{p_i}{\Delta x}$$

avec $\psi_{i,j} = 1 - \frac{|x_i - X_j|}{\Delta x} = \frac{X_{j+1} - x_i}{\Delta x}$, et $X_j = L_p + j\Delta x$.

Après coalescence, les deux particules résultantes doivent vérifier la condition 2 qui s'écrit pour le nœud j

$$\left(1 - \frac{|\tilde{x}_1 - X_j|}{\Delta x}\right)\tilde{p}_1 + \left(1 - \frac{|\tilde{x}_2 - X_j|}{\Delta x}\right)\tilde{p}_2 = \Delta x \,\rho_j^d. \tag{3.17}$$

Pour que ces deux particules restent toutes les deux dans la maille M_j (condition 1), il faut que

$$(\tilde{x}_1 - X_j) > 0$$
 et $(\tilde{x}_2 - X_j) > 0$,
 $(X_{j+1} - \tilde{x}_1) > 0$ et $(X_{j+1} - \tilde{x}_2) > 0$

L'équation (3.17) devient donc

$$(X_{j+1} - \tilde{x}_1)\tilde{p}_1 + (X_{j+1} - \tilde{x}_2)\tilde{p}_2 = \sum_{i=1}^{i=N} (X_{j+1} - x_i)p_i.$$

Comme $\tilde{p}_1 = \tilde{p}_2 = p/2$, cette équation est équivalente à

$$\tilde{x}_1 + \tilde{x}_2 = \frac{2}{p} \sum_{i=1}^{i=N} p_i x_i.$$
(3.18)

Si \tilde{x}_1 et \tilde{x}_2 sont donnés par (3.16) avec $\beta < \min(X_{j+1} - x, x - X_j)$, les particules résultantes sont dans la maille M_j . Par ailleurs, la relation (3.18) est vérifiée.

• La conservation de la densité $\rho_{j+1}^g = \sum_{i=1}^{i=N} \psi_{i,j+1} \frac{p_i}{\Delta x}$ revient elle aussi à vérifier la relation (3.18), ce qui achève la démonstration.

On a fait ce choix de la position en s'inspirant de ce qui était fait pour les vitesses. Pour la déterminer, il suffit donc de tirer β au hasard entre 0 et min $(X_{j+1} - x, x - X_j)$.

Mise en oeuvre de la coalescence sur Ω

La mise en oeuvre de la coalescence nécessitant un certain nombre de calculs, nous avons choisi de ne pas l'appliquer à chaque itération. Le paramètre T traduit la fréquence à laquelle on effectue la coalescence (T = 50 signifie que l'on effectue la coalescence toutes les 50 itérations). Nous l'exécutons maille par maille. On note N_j le nombre de particules dans la maille M_j à l'itération où la coalescence est effectuée.

On choisit deux paramètres entiers :

- N_1 le nombre "maximum" de particules dans une maille.
- $-N_2 < N_1$ le nombre minimum de particules dans une maille.

La valeur de N_2 doit permettre un bon compromis entre vitesse de calcul et précision des résultats. Si $N_j > N_1$ on effectue la coalescence dans la maille M_j . Les N_j particules sont réparties entre $\frac{N_2}{2}$ groupes de tailles équivalentes au sein desquels on effectue la coalescence. On se retrouve bien avec N_2 particules dans la maille à l'issue de la procédure (voir illustration dans le cas bidimensionnel, Fig. 3.14).

Résultats :

La description du cas de référence est donnée précisément dans la Section 4.2. Le domaine est discrétisé sur 100 mailles. On injecte 85 particules par itération, de poids $p_i = 5,091 \, 10^{-6}$. On ajoute une particule par maille et par itération pour prendre en

compte l'ionisation. Le poids de ces particules est maximum sur la frontière d'injection $(p_i \simeq 2 \, 10^{-6})$, puis décroît lorsqu'on s'en éloigne (Fig 3.8). Les résultats sont présentés au bout de 5000 Δt : la solution stationnaire est atteinte, et il y a alors 23000 particules dans le domaine. Nous verrons dans le Chapitre 4 que leur répartition est loin d'être homogène, et qu'il y a d'autant plus de particules par maille qu'on est proche de la frontière d'injection.

Nous considérons les trois cas de coalescence suivants :

- **1** $T = 100, N_1 = 60, N_2 = 40$ (Fig. 3.9).
- 2 $T = 50, N_1 = 60, N_2 = 40$ (Fig. 3.10).
- 3 $T = 50, N_1 = 40, N_2 = 20$ (Fig. 3.11).

Pour chacun de ces trois cas on trace (en grandeurs adimensionnées) à l'itération $5\,000$:

- (a) la densité de charge (noir), la densité de charge filtrée³ (bleu) et la densité de charge sans coalescence (rouge).
- (b) le poids des particules en fonction de leur position.
- (c) le nombre de particules dans le domaine en fonction de l'itération.

Notons r le rapport entre les poids les plus importants et le poids médian des particules créées par ionisation (10^{-6}) , les plus légères des particules présentes dans le domaine. Quand il n'y a pas de coalescence, le poids le plus important est celui des particules injectées, de sorte que $r \simeq 5$. L'accroissement de ce rapport permet d'évaluer l'augmentation du poids des particules du fait de la coalescence.

Chaque fois que l'on effectue la coalescence, on crée des particules plus lourdes (Fig.3.9-3.11 (b)). Le rapport r augmente, et cela se traduit par une densité plus bruitée (Fig.3.9-3.11 (a)). Plus on exerce la coalescence fréquemment, plus r augmente ($r \simeq 144$ pour le cas 1, $r \simeq 242$ pour le cas 2), et on observe un bruit accru.

Entre le cas 2 et le cas 3, on réduit le nombre de particules par maille après la phase de coalescence : on regroupe un plus grand nombre de particules entre elles, si bien que les particules résultantes sont plus lourdes ($r \simeq 500$ pour le cas 3) et ici encore on génère plus de bruit. En outre, on a maintenant en moyenne 6000 particules dans le domaine (Fig. 3.11 (c)), au lieu des 8000 du cas 2 (Fig. 3.10 (c)), ce qui tend à détériorer les résultats.

Nous avons distingué deux sources de bruit numérique (cf Remarque, page 85). Nous voulons vérifier que l'accroissement du bruit observé provient principalement de la différence entre les poids, et qu'il n'est pas dû à un nombre insuffisant de particules par maille. A cette fin, nous définissons un nouveau cas sans coalescence en réduisant le nombre de particules injectées à chaque itération par rapport au cas de référence. Au bout de 5000 itérations, il n'y a plus que 17014 particules. On constate que la densité n'est guère plus bruitée que la densité de référence, calculée à partir de 23000 particules (Fig. 3.12-(a)).

^{3.} La densité filtrée au nœud k est obtenue en moyennant les densités sur les nœuds k - 5 à k + 5.

Nous comparons ensuite cette densité avec le cas 1 avec coalescence : le nombre de particules est équivalent (16780), et pourtant la densité est sensiblement plus bruitée si la coalescence est mise en oeuvre 3.12-(b)).

Sur la Figure 3.13, on a tracé à l'itération 5000 le potentiel solution du cas de référence et les potentiels pour les cas 1, 2 et 3 : ils sont identiques.

Nous pouvons donc conclure en disant que la mise en œuvre de la coalescence induit un bruit numérique plus accru sur la densité du fait de plus fortes différences de poids entre les particules. C'est en particulier cet argument qui nous a fait rejeter la méthode d'injection des particules à poids variable (Section 3.4). Néanmoins, la coalescence ne modifie pas fondamentalement les résultats : même quand la densité calculée est très bruitée (cas 3), la densité filtrée reste proche de la densité de référence. Le potentiel n'est quant à lui pas perturbé par la mise en œuvre de la coalescence.



FIGURE 3.8 - Cas de référence, sans coalescence : poids des particules.



FIGURE 3.9 – Coalescence, cas 1 : $T = 100, N_1 = 60, N_2 = 40.$



FIGURE 3.10 – Coalescence, cas $2: T = 50, N_1 = 60, N_2 = 40.$



FIGURE 3.11 – Coalescence, cas $3: T = 50, N_1 = 60, N_2 = 20.$



FIGURE 3.12 – Détermination de l'origine de l'accroissement du bruit numérique.



FIGURE 3.13 – Influence de la coalescence sur le potentiel en 1D.

3.7.3 Cas bidimensionnel

Dans le cas bidimensionnel, la coalescence n'est utile qu'en amont de l'électrode plasma, puisqu'au delà (c'est-à-dire dans le faisceau) il y a beaucoup moins de particules par maille (voir Chapitre 4).

Conservation de la densité aux noeuds

Nous allons étendre les résultats de la section précédente à deux dimensions. On considère N particules situées dans la maille $M_{j,k}$ de sommets (j,k), (j,k+1), (j+1,k) et (j+1,k+1).

Comme dans le cas monodimensionnel, on souhaite que les particules résultantes restent dans la maille $M_{j,k}$ (condition 1) tout en permettant la conservation de la densité aux sommets de la maille $M_{j,k}$ (condition 2). Nous nous intéressons tout d'abord à la contribution des particules au nœud (j, k). Pour que celle-ci ne change pas après la coalescence, les positions $(\tilde{x}_1, \tilde{y}_1)$ et $(\tilde{x}_2, \tilde{y}_2)$ doivent vérifier la condition 2 qui s'écrit en ce nœud

$$\begin{pmatrix} 1 - \frac{|\tilde{x}_1 - X_j|}{\Delta x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 - \frac{|\tilde{y}_1 - Y_k|}{\Delta y} \end{pmatrix} \tilde{p}_1 + \begin{pmatrix} 1 - \frac{|\tilde{x}_2 - X_j|}{\Delta x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 - \frac{|\tilde{y}_2 - Y_k|}{\Delta y} \end{pmatrix} \tilde{p}_2 = \\ = \sum_{i=1}^{i=N} \sum_{i=1}^{i=N} \frac{(X_{j+1} - x_i)}{\Delta x} \frac{(Y_{k+1} - y_i)}{\Delta y} p_i.$$

Si les particules résultantes sont dans la maille $M_{j,k}$, cette relation devient

$$-(\tilde{x}_{1}+\tilde{x}_{2})Y_{k+1}-(\tilde{y}_{1}+\tilde{y}_{2})X_{j+1}+(\tilde{x}_{1}\tilde{y}_{1}+\tilde{x}_{2}\tilde{y}_{2})=2\left(-xL_{k+1}-yL_{j+1}+\frac{1}{p}\sum_{i=1}^{i=N}x_{i}y_{i}p_{i}\right),$$
(3.19)

avec

$$y = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{N} p_i y_i.$$

Cette relation est l'équivalent bidimensionnel de (3.18).

Comme en 1D, nous définissons les positions par

$$\tilde{x}_1 = x + \beta, \qquad \tilde{y}_1 = y + \gamma,
\tilde{x}_2 = x - \beta, \qquad \tilde{y}_2 = y - \gamma,$$
(3.20)

avec β et γ deux réels à déterminer de façon à vérifier les conditions 1 et (3.19). La relation (3.19) est donc équivalente à

$$\frac{1}{p} \sum_{i=1}^{i=N} x_i y_i p_i - xy = \beta \gamma.$$
(3.21)

On peut alors démontrer la proposition suivante :

Proposition 14

Soit N particules de positions (x_i, y_i) et de poids p_i contenues dans la maille $M_{j,k}$ et (x, y) les coordonnées de leur barycentre.

So it $\beta_M = \min(X_{j+1} - x, x - X_j)$ et $\gamma_M = \min(Y_{k+1} - y, y - Y_k)$.

Il est possible de trouver deux réels β et γ permettant de vérifier simultanément les conditions 1 et (3.21) si et seulement si les positions et les poids des particules sont telles que

$$\left|\frac{1}{p}\sum_{i=1}^{i=N} x_i y_i p_i - xy\right| < \beta_M \gamma_M. \tag{3.22}$$

Preuve. Deux cas se présentent

• Si $\frac{1}{p} \sum_{i=1}^{i=N} x_i y_i p_i > xy$, $\beta \gamma > 0$. Nous choisissons $\beta > 0$ et $\gamma > 0$ (si on prenait β et γ négatifs, cela reviendrait à échanger les particules 1 et 2). Les particules résultantes dont la position est donnée par (3.20) doivent vérifier

$$\left\{ \begin{array}{l} X_j < \tilde{x}_l < X_{j+1} \\ Y_k < \tilde{y}_l < Y_{k+1} \end{array} \right., \ l = 1, 2, \label{eq:constraint}$$

ce qui revient à imposer la contrainte

$$\begin{cases} 0 < \beta < \min(X_{j+1} - x, x - X_j) = \beta_M \\ 0 < \gamma < \min(Y_{k+1} - y, y - Y_k) = \gamma_M. \end{cases}$$
(3.23)

Il existe β et γ vérifiant (3.21) et (3.23) si et seulement si

$$\frac{1}{p} \sum_{i=1}^{i=N} x_i y_i p_i - xy < \beta_M \gamma_M.$$
(3.24)

• Si $\frac{1}{p} \sum_{i=1}^{i=N} x_i y_i p_i < xy$, alors $\beta \gamma < 0$ et on choisit $\beta < 0$ et $\gamma > 0$. La contrainte (3.23) s'écrit alors

$$\begin{cases} -\min(X_{j+1} - x, x - X_j) = -\beta_M < \beta < 0\\ 0 < \gamma < \min(Y_{k+1} - y, y - Y_k) = \gamma_M \end{cases}$$

et la condition de compatibilité (3.24) devient

$$\frac{1}{p}\sum_{i=1}^{i=N}x_iy_ip_i - xy > -\beta_M\gamma_M.$$

D'une manière générale, la condition de compatibilité s'écrit bien sous la forme (3.22).■

Les particules dont les positions sont données par (3.20) sont alors dans la maille $M_{j,k}$ et assurent la conservation de la contribution à la densité au noeud (j,k). On vérifie aisément qu'il en est de même sur les trois autres noeuds de la maille.

Application : calcul des positions des particules résultantes

Si la relation (3.24) est vérifiée, on a

$$|\beta| = \frac{1}{\gamma} \left| \frac{1}{p} \sum_{i=1}^{i=N} x_i y_i p_i - xy \right|.$$

On tire donc γ au hasard entre $\left|\frac{1}{p}\sum_{i=1}^{i=N} x_i y_i p_i - xy\right| / \beta_M$ et γ_M , puis on en déduit la valeur de $|\beta|$. Il ne reste plus qu'à prendre

$$\beta = \operatorname{signe}\left(\frac{1}{p}\sum_{i=1}^{i=N} x_i y_i p_i - xy\right). |\beta|.$$

Toutefois, la condition de compatibilité (3.22) n'est pas toujours vérifiée : cela veut dire qu'il n'est pas possible d'assurer la conservation de la densité tout en maintenant les particules résultantes dans la maille si leurs positions sont données par (3.20). Dans ce cas, on pose simplement

$$\begin{cases} \tilde{x}_1 = \tilde{x}_2 = x\\ \tilde{y}_1 = \tilde{y}_2 = y \end{cases}.$$

On privilégie ainsi la vérification de la condition 1 de façon à continuer à exercer la coalescence maille par maille.

Nous avons constaté que cette situation se rencontre assez rarement. Cette méthode permet donc de conserver la densité sur une grande majorité des nœuds (Fig. 3.16-b). En outre, l'erreur commise sur quelques nœuds perturbe peu les résultats (voir Résultats).■

La mise en œuvre de la coalescence est réalisée de la même façon que dans le cas monodimensionnel, maille par maille. S'il y a $N_{j,k}$ particules dans la maille $M_{j,k}$, on les répartit entre $N_2/2$ groupes; on effectue la coalescence de manière à avoir N_2 particules dans la maille à l'issue de la procédure (Figure 3.14).



FIGURE 3.14 – Coalescence sur la maille $M_{k,j}$ avec $N_2 = 10$, $N_{k,j} = 26$.

Résultats

On considère une simulation sur la diode modèle (cf. Fig. 3.1). Ce cas test est détaillé dans la Section 4.3. On injecte 85 particules par maille voisine de la frontière d'injection, et on crée une particule par nœud et par itération pour l'ionisation. La coalescence n'est pratiquée qu'en amont de l'électrode plasma. Le maillage qui recouvre ce sous-domaine est constitué de 1500 mailles, correspondant à 1616 nœuds (j = 0 à 100, k = 0 à 15). On regarde la solution stationnaire (sans coalescence) au temps 10000 Δt ; on considère que la solution stationnaire est alors atteinte, et on compte 339 000 particules.

Nous commençons par regarder l'effet de la phase de coalescence. Pour cela, nous effectuons 10000 itérations sans coalescence, puis nous appliquons la coalescence, en se ramenant à 40 particules par maille dans la chambre à plasma, ce qui donne 70000 particules dans le domaine.

On représente sur la Figure 3.15 le nombre de particules contenues dans une tranche verticale de 10 mailles de large (j = 1 à 10 et k = 1 à 15 pour la première tranche, j = 11 à 20 et k = 1 à 15 pour la deuxième, ...) avant et après la phase de coalescence.



FIGURE 3.15 - Réduction du nombre de particules par tranche verticale sous l'effet de la coalescence.

On a tout d'abord vérifié que l'erreur due à la coalescence sur la charge totale, les composantes moyennes des vitesses et l'énergie moyenne est rigoureusement nulle. Il en va de même pour la projection des poids des particules sur les nœuds. Dans ce cas précis, la condition de compatibilité (3.22) ne peut pas être vérifiée pour 59 groupes de particules sur 56 520. Toutes les autres vérifications qui ont été faites donnent une proportion de un groupe sur mille pour lequel on n'effectue pas la coalescence : cette situation se rencontre donc très rarement. Sur la Figure 3.16-(a), on trace une coupe longitudinale de la densité (k = 7) avant (rouge) et après (noir) la coalescence : il n'y a pas de différence visible. Enfin, on représente la position des particules dans une maille (k = 8, j = 20) avant et après coalescence (b), ce qui permet de constater que la répartition des particules issues de la coalescence est homogène.

Il s'agit de voir si l'erreur sur la densité ne s'amplifie pas au cours du temps. Nous allons donc comparer une simulation sans coalescence avec une simulation avec coalescence au bout de 10000 itérations. On considère un cas pour lequel on applique la coalescence toutes les 100 itérations, avec $N_1 = 60$ et $N_2 = 40$. Ce sont les mêmes valeurs que dans la définition du cas 1 en une dimension (voir Section précédente, page 89). Sur la Figure 3.17-(a) on représente le nombre de particules dans tout le domaine en fonction du temps. Il y a en moyenne 160 000 particules dans le domaine (70 000 immédiatement après coalescence), contre 340 000 en l'absence de coalescence. On représente sur la Figure 3.17-(b), une coupe de la densité (k = 7) sans coalescence (rouge), et avec coalescence (noir). Comme en une dimension, nous constatons que la coalescence introduit un bruit numérique. Il est également dû à la présence de particules de poids très différents. Toutefois, ce bruit n'est guère plus important en 2D qu'en 1D (comparer avec la Figure 3.9-(a)). Quand on lisse la densité (courbe bleu), nous observons qu'il y a très peu de différence par rapport à la densité sans coalescence.

On trace également le courant qui traverse l'électrode plasma en fonction des itérations (Fig. 3.19) : la coalescence fait peu varier le niveau du courant (lissé). Nous constatons par ailleurs que l'accroissement du bruit numérique sur la densité et le courant n'ont pas d'influence sur le potentiel, qui est identique avec ou sans coalescence (Fig. 3.18).

Nous avons vu que la coalescence était plus délicate à réaliser en 2D qu'en 1D. En particulier, on ne peut pas assurer la conservation stricte de la densité aux nœuds avec la méthode choisie. Ces travaux préliminaires ont permis d'explorer une technique de coalescence. Il reste du travail à accomplir, notamment si l'on veut conserver la densité de courant projetée sur les nœuds. Dans ce cas, il faudra très certainement choisir la vitesse des particules résultantes de manière moins arbitraire que ce qui est fait dans la Section3.7.1. Pour l'heure, nous constatons que la différence avec une simulation sans coalescence ne réside que dans l'augmentation du bruit numérique. L'observation de la densité lissée, ou du potentiel montre que, en 2D comme en 1D, la coalescence permet de conserver l'essentiel des phénomènes à décrire.



(a) effets de la phase de coalescence sur la densite





FIGURE 3.16 – Mise en œuvre de la coalescence sur une itération



FIGURE 3.17 – Coalescence en 2D, cas 1 : T = 100, $N_1 = 60$, $N_2 = 40$.



FIGURE 3.18 – Influence de la coalescence sur le courant de sortie en 2D.



FIGURE 3.19 – Influence de la coalescence sur le potentiel en 2D (coupe dans la chambre à plasma).

3.8 Particularités pour une géométrie axisymétrique. Coordonnées cylindriques

Pour un problème axisymétrique, en coordonnées cylindriques, une maille est un anneau d'épaisseur Δz et de rayon Δr (Fig. 3.20). Une particule numérique est un anneau qui se déplace dans un cylindre d'axe z. L'ordonnée d'une particule, r, est le rayon de cet anneau, qui reste dans un plan normal à l'axe.



FIGURE 3.20 – Géométrie axisymétrique.

L'axe de symétrie du système est noté Γ_0 . C'est une frontière artificielle où nous devons vérifier les deux conditions

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \nu}|_{\Gamma_0} = 0$$

 et

$$f|_{\Gamma_0}(v)_{(v,\nu)<0} = f|_{\Gamma_0}(v)_{(v,\nu)>0},$$

qui est une condition de réflexion.

Les différences par rapport à ce qui est fait en géométrie cartésienne résident

- dans le calcul du poids des particules injectées et des particules créées par ionisation,
- dans la projection sur les nœuds pour y calculer la densité,
- dans la discrétisation de l'équation de Poisson.

3.8.1 Calcul du poids des particules

• Commençons par calculer le poids des particules injectées sur la frontière Γ_p . On Considère la maille $M_{0,k} = [0,1] \times [k, k+1]$. La surface d'une tranche verticale de cette maille est $\mathcal{A}_k = (2k+1)\pi\Delta r^2$. La charge qui entre dans cette maille pendant Δt est donc égale à

$$p^k = j_p \Delta \mathcal{A}_k p^k = j_p \Delta t (2k+1) \pi \Delta r^2,$$

la densité de courant étant donnée par 2.24. On choisit d'injecter toutes les particules entre r_k et r_{k+1} avec le même poids (on note toujours η le nombre de ces particules). Le poids d'une particule *i* injectée sur la maille $M_{0,k}$ est alors

$$p_i^k = \frac{j_p \Delta t}{\eta} (2k+1)\pi \Delta r^2.$$

• Le poids des particules créées par ionisation sur les nœuds (j,k), au taux $s(n_e) = \sqrt{2}e^{-\gamma\Phi(z,r)}$ est quant à lui donné par

$$p_{i} = \int_{t}^{t+\Delta t} \int_{0}^{2\pi} \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{r_{k-1/2}}^{r_{k+1/2}} s^{h}(n_{e}) r dr dz d\theta dt = 2\pi \sqrt{2} \Delta t \int_{z_{j-1/2}}^{z_{j+1/2}} \int_{r_{k-1/2}}^{r_{k+1/2}} e^{-\gamma \Phi^{h}(z,r)} r dr dt,$$

de sorte que, avec Φ^h constant sur le volume d'intégration $M_{j-1/2,k-1/2}$ (Fig. 3.20),

$$\begin{cases} p_i = 2\pi\sqrt{2}k\Delta r^2\Delta z\Delta t \exp(-\gamma\Phi_{j,k}) \text{ si } k \neq 0\\ p_i = \frac{\pi\sqrt{2}}{2}\Delta r^2\Delta z\Delta t \exp(-\gamma\Phi_{j,0}) \text{ si } k = 0 \end{cases}$$

Il reste à traiter la projection des poids des particules sur les nœuds afin d'y calculer la densité.

3.8.2 Calcul de la densité aux nœuds

Le nœud (j, k) est sommet de l mailles notées M_l , avec $1 \le l \le 4$ (l = 4 correspond à un nœud intérieur, l < 4 à un nœud situé sur une frontière). La densité en ce nœud dépend des particules, de coordonnées (z_i, r_i) , contenues dans $\Omega_{i,k} = \bigcup M_l$.

En coordonnées cylindriques, on approche rf au sens des mesures par $(rf)^h$ définie par

$$(rf)^{h}(z,r,v_z,v_r,t) = \sum_{i\in\Omega} p_i\delta(z-z_i)\delta(r-r_i)\delta(v_z-v_{z_i})\delta(v_r-v_{r_i}).$$

On définit la densité approchée ρ^h par

$$(r\rho)^h(z,r) = \int (rf)^h(z,r,v)dv$$

de telle façon que, pour toute fonction test $\chi \in C_0^0(\Pi)$,

$$< r
ho, \chi > \simeq < (r
ho)^h, \chi > .$$

Comme en géométrie cartésienne, on considère les fonctions linéaires par morceaux

$$\psi_{j,k}(z,r) = \begin{cases} \left(1 - \frac{|z - Z_j|}{\Delta z}\right) \left(1 - \frac{|r - R_j|}{\Delta r}\right) & \text{si } (z,r) \in \Omega_{j,k} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases},$$

puis on définit la densité au nœud (j, k) par

$$\rho_{j,k} = \frac{\langle (r\rho)^h, \psi_{j,k} \rangle}{\int_{\Omega} \psi_{j,k} r dr dz d\theta} = \frac{1}{\int_{\Omega} \psi_{j,k} r dr dz d\theta} \sum_{i \in \Omega_{j,k}} p_i \psi_{j,k}(\xi_i).$$

Si (j, k) est un nœud intérieur on calcule,

$$\int_{\Omega} \psi_{j,k} r dr dz d\theta = 2\pi \Delta r^2 \Delta z \left(2 \times \frac{3k-1}{12} + 2 \times \frac{3k+1}{12} \right) = 2\pi k \Delta r^2 \Delta z,$$

et de ce fait la densité sur ce nœud est

$$\rho_{j,k} = \frac{1}{2\pi k \Delta r^2 \Delta z} \sum_{i \in \Omega_{j,k}} \left(1 - \frac{|z_i - Z_j|}{\Delta z} \right) \left(1 - \frac{|r_i - R_k|}{\Delta r} \right) p_i.$$

Les densités aux autres nœuds sont calculées de manière similaire, seule l'expression de $\int_{\Omega} \psi_{j,k} r dr dz d\theta$ changeant. En particulier, si le nœud se trouve sur l'axe du cylindre,

$$\rho_{j,0} = \frac{3}{\pi \Delta r^3 \Delta z} \sum_{i \in \Omega_{j,k}} \left(1 - \frac{|z_i - Z_j|}{\Delta z} \right) \left(\Delta r - r_i \right) p_i.$$

3.8.3 Résolution de l'équation de Poisson

Comme en géométrie cartésienne, nous linéarisons l'équation de Poisson par une méthode de Newton. Nous devons ensuite à chaque itération m de l'algorithme de Newton résoudre l'équation

$$\varepsilon^2 \Delta \varphi^m - a^{m-1} \varphi^m = g^{m-1} = \rho - e^{-\varphi^{m-1}} (1 + \varphi^{m-1}),$$
 (3.25)

en notant $a^{m-1} = e^{-\varphi^{m-1}}$. Pour cela, nous utilisons la méthode de gradient conjugué décrite dans la Section 3.6.

La différence avec le cas cartésien réside dans la forme du système linéaire. En effet, le laplacien en coordonnées cylindriques s'écrit dans le cas axisymétrique

$$\Delta \varphi = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r \frac{\partial \varphi}{\partial r}) + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \varphi}{\partial r}.$$

La discrétisation de (3.25) sur la maille duale $M_{j-1/2,k-1/2}$, $k \neq 0$ (Fig. 3.21), donne alors

$$\varepsilon^{2} \frac{\varphi_{j+1,k} - 2\varphi_{j,k} + \varphi_{j-1,k}}{\Delta z^{2}} + \varepsilon^{2} \frac{\varphi_{j,k+1} - 2\varphi_{j,k} + \varphi_{j,k-1}}{\Delta r^{2}} + \varepsilon^{2} \frac{\varphi_{j,k+1} - \varphi_{j,k-1}}{2r_{k}\Delta r} - a_{j,k}\varphi_{j,k} = g_{j,k},$$
(3.26)

en approchant r par $r_k = k\Delta r$ sur $M_{j-1/2,k-1/2}$.

Sur l'axe, pour k = 0, on a

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial\varphi}{\partial r}\right)\Big|_{k=0} = \left.\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(rE_r\right)\right|_{k=0}.$$
Le volume de contrôle $M_{j-1/2,-1/2}$ représente une demi-maille. Comme le champ radial est nul sur l'axe, on a

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r\frac{\partial\varphi}{\partial r})\Big|_{j,0}\simeq \frac{1}{r_0}\frac{1}{\Delta r/2}\left(r_{1/2}\frac{\varphi_{j,1}-\varphi_{j,0}}{\Delta r}\right)$$

avec $r_0 = \Delta r/4$, de sorte que

$$\varepsilon^{2} \frac{\varphi_{j+1,0} - 2\varphi_{j,0} + \varphi_{j-1,0}}{\Delta z^{2}} + \varepsilon^{2} \frac{\varphi_{j,1} - \varphi_{j,0}}{r_{0} \Delta r} - a_{j,0} \varphi_{j,0} = g_{j,0}.$$
(3.27)

La modification du système linéaire formé des équations (3.26) et (3.27) par la prise en compte des autres conditions limites ne diffère pas de ce qui est fait en géométrie cartésienne.



FIGURE 3.21 – Définition des volumes de contrôle.

3.9 Conclusion

A l'issu de ce chapitre, nous disposons d'un code particulaire permettant la résolution du système de Vlasov-Poisson défini dans le chapitre 1, ainsi que la prise en compte des conditions limites sur la frontière artificielle Γ_i , déterminées dans le chapitre 2. Les spécificités de ce code "PIC", adapté à des géométries axisymétriques, résident dans le traitement de l'injection des particules sur Γ_i , dans la création de particules par ionisation et dans la résolution de l'équation de Poisson, linéarisée par une méthode de Newton. Une méthode de coalescence a également été développée dans le but de réduire le nombre de particules. Nous avons vérifié que cette méthode, même si elle se traduit par l'accroissement du bruit numérique donne des résultats comparables à ceux d'une simulation sans coalescence.

La validation de ce code et son application sur un cas test sont présentées dans le chapitre suivant.

Chapitre 4

Résultats

4.1 Introduction

Le but de ce chapitre est tout d'abord de valider le code particulaire décrit dans le Chapitre 3. Dans le cas monodimensionnel, des solutions de référence sont données par la résolution du problème de Poisson non linéaire (cf. Section 2.3) et par les résultats analytiques de l'approximation quasi-neutre (cf. Section 2.4). Nous vérifions que le code particulaire en 1D, cartésien, donne les mêmes résultats, en restant en grandeurs adimensionnées (Section 4.2). Nous procédons de manière identique pour le code particulaire bidimensionnel sur la diode modèle qui a servi à illustrer la résolution numérique (Section 4.3).

L'objet de la Section 4.4 est de valider le modèle d'extraction. A cette fin, nous adaptons un cas test lié à la source d'ions SILHI et pour lequel on dispose de résultats expérimentaux et numériques. Nous montrons dans quelle mesure la méthode de simulation que nous avons développée permet de les retrouver.

4.2 Validation 1D

Nous allons valider la détermination des conditions aux limites et la méthode particulaire utilisée pour résoudre le problème de Vlasov-Poisson monodimensionnel et *adimen*sionné. On considère un plasma neutre borné par une électrode portée au potentiel Φ_c).

Nous traitons le cas de référence monodimensionnel correspondant aux données suivantes : Paramètres caractéristiques :

 $\varepsilon = 10^{-2}$ $\gamma = 1$ (taux d'ionisation proportionnel à n_e) Potentiel de l'électrode et position par rapport au "centre" du plasma : $\Phi_c = 10,0153$ $L_c = 0,5409$ Caractéristiques de la frontière d'injection : $\Phi_p = 0,3773$ $L_p = 0,3407$ (La taille du domaine considéré correspond à $20\lambda_D$). Pas de discrétisation :

 $\Delta x = 2\,10^{-3},$ ce qui représente donc 101 no euds et 100 mailles.

 $\Delta t = 10^{-3}$

Nombre de particules injectées à chaque itération : $\eta = 100$.

Nombre de particules effectivement injectées à chaque itération (après correction) $\bar{\eta} = 85$.

Nous observons les résultats de la simulation particulaire au bout de 5000 itérations. Nous considérons que la solution stationnaire est atteinte. On compte 24500 particules dans le domaine, soit près de 250 par maille. Cela est censé procurer une approximation suffisamment précise de la fonction de distribution ionique au regard des critères usuellement retenus dans les simulations particulaires 1D. Rappelons que la densité, le courant et l'énergie sont calculés respectivement par la projection sur les nœuds des poids p_i et des produits $p_i v_i$ et $\frac{1}{2} p_i v_i^2$. La vitesse v_i aux nœuds est donnée par le rapport du courant sur la densité. Ces quantités sont représentées par les courbes noires sur les Figures 4.1, 4.2 et 4.3.

Nous comparons tout d'abord ces résultats à la solution analytique de l'approximation quasi-neutre (Section 2.4.3). La densité, le courant et l'énergie sont respectivement donnés par

$$\rho_p(\Phi) = e^{-\Phi},$$
$$j_p(\Phi) = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} D(\sqrt{\Phi})$$

 et

$$k_p(\Phi) = \frac{1}{2} \left(1 - e^{-\Phi} \right).$$

La vitesse est donnée par

$$v_p(\Phi) = \frac{j_p(\Phi)}{\rho_p(\Phi)} = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} D(\sqrt{\Phi}) e^{\Phi}.$$

Rappelons que le domaine de validité de cette approximation est limité à $x < a_1 = 0, 404$, et $\Phi < \Phi_a = 0, 854$. Nous constatons sur la Figure 4.1 qu'il y a concordance entre les deux solutions pour $x < a_1$. Au-delà, la comparaison n'a bien sûr plus de sens. Nous pouvons faire d'autres observations annexes : le courant et l'énergie sont d'autant plus bruités que l'on s'éloigne de la zone plasma; c'est dû au fait que dans le même temps le potentiel croît de plus en plus vite, ce qui accélère les particules qui avaient tendance à stagner dans la zone plasma. La répartition des particules dans le domaine de calcul n'est donc pas homogène : il y a moins de particules par maille dans la gaine (à droite) si bien que l'approximation particulaire est moins précise. Notons toutefois que la vitesse, donnée par le rapport de deux quantités bruités, ne fait pas apparaître d'oscillations numériques aussi marquées.

Nous pouvons également comparer les résultats de la simulation particulaire à la solution du problème de Poisson non linéaire (autrement qualifié ici de problème de Cauchy) obtenue dans la Section 2.3.2, et représentée en rouge sur la Figure 4.2. Nous constatons ici aussi que les résultats sont similaires. Notons également qu'il n'y a pas d'oscillations visibles sur le potentiel. En effet, il est obtenu par une double intégration de la densité dans l'équation de Poisson, et de ce fait est lissé par l'effet régularisateur de l'intégration.

La simulation particulaire que nous étudions a été réalisée en utilisant la technique de correction de l'injection développée dans la Section 3.4. Nous représentons sur la Figure 4.3 les résultats d'une simulation particulaire pour laquelle l'injection n'est pas corrigée, en les comparant à la solution du problème de Poisson non linéaire. Nous constatons une mauvaise approximation de la densité, qui est en particulier largement surestimée à l'origine. Le potentiel est lui aussi affecté, quoique dans une moindre mesure. Remarquons que l'erreur se corrige, puisqu'aussi bien la densité que le potentiel sont corrects en sortie de domaine. La correction de l'injection permet toutefois d'avoir une bonne approximation sur l'ensemble du domaine (Fig. 4.2).

Dans les résultats que nous avons montré jusqu'à présent, nous avons utilisé le pas d'espace $\Delta x = 2 \, 10^{-3} = \varepsilon/5$, soit un cinquième de la longueur de Debye adimensionnée, alors que nous avons établi qu'il suffisait de prendre $\Delta x = \varepsilon$ pour avoir une approximation suffisamment précise (Section 3.3.3). Nous avons fait ce choix car en une dimension il n'est pas trop pénalisant de considérer un maillage plus fin qu'il n'est nécessaire. Pour vérifier qu'il suffit bien de prendre un pas d'espace égal à la longueur de Debye, nous comparons sur la Figure 4.4 les résultats d'une simulation PIC avec $\Delta x = \varepsilon/5$ (noir, discrétisation sur 100 mailles) et ceux d'une simulation avec $\Delta x = \varepsilon$ (bleu, discrétisation sur 20 mailles). Ils sont bien équivalents. La densité est moins bruitée avec un pas d'espace plus grand, et le potentiel est identique dans les deux cas.



FIGURE 4.1 – Comparaison PIC 1D et approximation quasi-neutre.



FIGURE 4.2 – Comparaison PIC 1D et problème de Poisson non linéaire.



FIGURE 4.3 – Conséquence d'une injection non corrigée.



FIGURE 4.4 – Modification du pas d'espace.

4.3 Résultats bidimensionnels sur la diode modèle

Nous allons appliquer la méthode particulaire en deux dimensions sur la diode modèle que nous avons définie dans la Section 1.5. Le domaine considéré est rappelé sur la Figure 4.5. Pour valider la simulation 2D, nous la comparons avec des résultats de référence 1D. Nous regardons ensuite comment ce problème modèle nous permet d'ores et déjà d'illustrer l'influence d'un paramètre extérieur, en l'occurrence le potentiel d'extraction. Enfin, nous vérifions que différentes initialisations de la simulation donnent la même solution stationnaire.

Le cas traité est défini par les données suivantes Paramètres caractéristiques :

 $\varepsilon = 10^{-2}$ $\gamma = 1$ Potentiel de l'électrode plasma et position par rapport au "centre" du plasma : $\Phi_c = 10,0153$ $L_c = 0,5409$ Caractéristiques de la frontière d'injection : $\Phi_p = 0,3773$ $L_p = 0,3407$ Caractéristiques de l'électrode extractrice : $\Phi_{s} = 100$ $L_s = 0, 6$ Pas de discrétisation : $\Delta x = 2 \, 10^{-3}$, ce qui représente donc 101 noeuds et 100 mailles. $\Delta y = 2 \, 10^{-3}$, soit 16 mailles suivant l'axe y. $\Delta t = 10^{-3}$ Nombre de particules injectées à chaque itération : $\eta = 100$.

Nombre de particules effectivement injectées à chaque itération (après correction) $\bar{\eta} = 85$.



FIGURE 4.5 – Domaine d'étude 2D, diode modèle.

Les abscisses intermédiaires considérées lors de la représentation des résultats (Fig. 4.7) sont $L_1 = 0, 52, L_2 = 0, 535$ et $L_3 = 0, 558$, et les coupes horizontales sont faites en $y = 7\Delta y$ (au niveau du trou).

Les résultats sont présentés à l'itération 5000 (solution stationnaire atteinte). Il y a alors exactement 339624 particules dans le domaine. Le domaine peut se diviser entre la chambre à plasma en amont de l'électrode plasma (1), le trou pratiqué dans cette électrode (2), et la zone qui s'étend dans la prolongation du trou jusqu'à l'électrode d'extraction (3) (cf. Fig. 4.5). Nous indiquons dans le tableau suivant pour chacune de ces zones le nombre de mailles, le nombre de particules qui s'y trouvent et enfin le nombre de particules par maille en moyenne.

	chambre plasma	trou	faisceau
nombre de mailles	1 600	48	192
nombre de particules	331 115	2 9 9 2	5517
particules par mailles	207	62	29

La répartition est inhomogène, et ce sont les particules situées dans la chambre qui sont responsables d'une grande partie du temps de calcul. Cela restera vrai, même dans les cas réalistes présentés dans la section suivante et pour lesquels la taille de la chambre a été minimisée. Il serait certes possible de diminuer la quantité de particules contenues dans la chambre à plasma en limitant le nombre de particules injectées sur la frontière émissive Γ_i , mais cela se traduirait également par une diminution du nombre de particules dans le faisceau, ce qui ne permettrait plus d'obtenir une discrétisation suffisante de la fonction de distribution dans cette zone. C'est un des principaux inconvénients de cette méthode entièrement particulaire.

Figure 4.6 : validation. On représente une coupe de la densité dans la chambre à plasma $(L_p < x < L_c)$. On la compare à la densité solution du problème de Poisson non linéaire : elles sont semblables, au bruit numérique près. On constate par ailleurs que le bruit ne présente pas plus d'amplitude qu'en 1D (Fig. 4.1). La simulation PIC permet en outre de retrouver exactement le potentiel de référence.

Figure 4.7 : influence de paramètres sur la forme du faisceau. Nous comparons maintenant deux cas bidimensionnels : celui que nous avons défini plus haut, et un second dans lequel on fait varier le potentiel de sortie Φ_s , toutes les autres données restant identiques. Nous représentons, à gauche pour $\Phi_s = 100$ et à droite pour $\Phi_s = 500$, la densité (a) et le potentiel (b) en isovaleurs sur tout le domaine, un zoom sur ces deux grandeurs au niveau du trou, pour $L_2 < x < L_3$ ((c) et (d)), et la position des particules pour $L_1 < x < L_s$. Notons que la proportion entre les axes x et y n'est pas respectée sur ces Figures.

Quand Φ_s augmente, le champ est plus élevé dans le trou (les lignes de potentiels sont plus rapprochées) et le potentiel est perturbé jusque dans la chambre à plasma (cas d'un ménisque rentrant) (d2). Les particules, qui se déplacent perpendiculairement aux lignes de potentiel, se croisent dès la sortie du trou (e2); on observe une focalisation trop brutale du faisceau (densité élevée (c2)) qui est suivie d'une divergence des particules ((a2) (e2)).

Dans le cas $\Phi_s = 100$, le champ est plus faible dans le trou, les particules convergent plus lentement et le faisceau n'explose plus avant d'avoir atteint l'électrode de sortie ((a1) (*e1*)).

Figure 4.8 : effets de l'initialisation. Nous considérons les deux initialisations suivantes de la densité et du potentiel :

1] en bleu : $n = \rho_p(\Phi_p) = \exp(-\Phi_p)$ dans la chambre, n = 0 ailleurs.

 Φ croît linéairement de Φ_p à Φ_s sur $[L_p, L_s]$.

2] en rouge :

n = 0 partout.

 $\Phi = \Phi_{CI}$ (solution 1D du problème de Cauchy) dans la chambre à plasma,

 $\Phi = \Phi_c$ dans le trou,

 Φ croît linéairement de Φ_c à Φ_s au-delà de l'électrode.

Dans tous les cas, l'initialisation est monodimensionnelle dans le sens où les fonctions ne varient pas dans la direction transverse.

Nous représentons la densité et le potentiel à t = 0 pour ces deux initialisations ((a) et (b)) par une coupe longitudinale sur tout le domaine (chambre + trou + espace interélectrodes). Nous traçons ensuite les solutions stationnaires pour les deux initialisations au temps $t = 5\,000\,\Delta t$ ((c) et (d)). Nous constatons qu'elles sont identiques, tant sur le potentiel que sur la densité (coupes entre L_p et L_s), ce qui justifie bien que l'initialisation ne joue pas sur le résultat final.



FIGURE 4.6 – Comparaison PIC 2D / Cauchy 1D.



FIGURE 4.7 – Influence du potentiel de sortie sur la forme du faisceau.



FIGURE 4.8 – Influence de l'initialisation sur la densité et le potentiel (coupe sur le domaine complet).

4.4 Application à un cas réaliste

4.4.1 Structure du code MEFISTO

Le nom de ce code est un acronyme pour Modélisation de l'Extraction d'un Faisceau d'Ions à partir d'un plaSma neuTre d'hydrOgène. Il est structuré ainsi :

- Un pré-processeur destiné à calculer le potentiel sur la frontière d'injection, Φ_p à partir du potentiel plasma imposé sur l'électrode plasma (Section 1.3) et en utilisant la méthode décrite dans la Section 2.5.
- Un second pré-processeur pour déterminer les vitesses d'injection sur chaque maille de la frontière Γ_p avec la technique de correction de l'injection (page 76).
- Un programme principal qui gère la résolution auto-consistante du système de Vlasov-Poisson, sur un maillage structuré, en géométrie cartésienne ou cylindrique (axisymétrique), ainsi que la sortie de certains diagnostics. Il résout le système *adimensionné*. Lors des simulations sur des cas réalistes, les résultats sont convertis en grandeurs physiques avant la sortie des diagnostics.

Divers post-processeurs pour le traitement des diagnostics sur les particules.

Le code, écrit en FORTRAN 90, permet une gestion dynamique des tableaux de particules (positions, vitesses, poids). Cela permet d'adapter la taille de ces tableaux en fonction des particules "créées" (injectées ou dues à l'ionisation) et des particules "supprimées" (sorties du domaine, ou à la suite de la coalescence). Remarquons que, à cause de l'ionisation qui a lieu ou pas en fonction de la valeur du potentiel (seules des particules "suffisamment lourdes" sont créées) et de la coalescence, il est difficile de savoir à priori combien le domaine peut compter de particules. C'est ce qui nous a orienté vers cette gestion dynamique.

Les simulations ont été effectuées sur des stations (pour les validations), sur Cray T90 (vectorisation de certaines procédures), et principalement sur DEC Alpha. L'avantage de cette machine par rapport à une station de travail réside dans sa mémoire vive (2 Go de RAM), et dans les temps d'accès réduit entre le processeur, cadencé à 531 MHz (1.06 Gflops en crête), et la mémoire Cette caractéristique est particulièrement intéressant pour gérer des tableaux de grande taille où sont stockées les quantités liées aux particules.

4.4.2 Description du cas de référence

Nous nous sommes inspirés des calculs réalisés dans le cadre du projet IPHI¹ dans [2], rapport qui traite de simulations numériques réalisées sur la ligne de transport basse énergie de l'injecteur (voir Figure 1 dans l'introduction générale). Celle-ci est composée du système axi-symétrique d'électrodes d'extraction qui nous intéresse, suivi de dispositifs destinés à maintenir la focalisation du faisceau (on utilise des solénoïdes pour imposer

^{1.} IPHI=Injecteur de Protons à Haute Intensité, CEA / Direction de la Science et de la Matière, Saclay.

un champ magnétique extérieur). Le plasma émetteur est composé de protons (85 %), de H_2^+ (10 %) et de H_3^+ (5 %), la densité de courant est de 1500 A m⁻².

Les simulations numériques sur la zone d'extraction ont été réalisées avec un code "industriel", AXCEL. Le dispositif d'extraction (axi-symétrique), ainsi que la forme du faisceau calculé par AXCEL, sont représentés sur la Figure 4.9. Le courant calculé en sortie de l'extracteur est de 118 mA (dont 100 mA pour les protons).

4.4.3 Définition d'un cas test

Notre code n'étant pas prévu pour gérer des maillages non structurés, nous simplifions le dispositif, qui reste axi-symétrique, en considérant une série d'électrodes planes et rectangulaires. L'épaisseur des électrodes et les distances qui les séparent sont adaptés en fonction du cas de référence. Nous gardons les mêmes potentiels². Comme les électrodes sont planes, le champ radial est nul quand on s'éloigne de l'axe. De plus, les particules émises loin de l'axe ne contribuent pas à la formation du faisceau : il est donc possible de réduire le rayon total du domaine. Les caractéristiques du domaine de simulation sont représentées sur la Figure 4.10. Nous rappelons par ailleurs que nous traitons qu'une seule espèce d'ions, des protons.

Les paramètres de la simulation sont les suivants : Densité du plasma : $n_0 = 10^{17} \text{ m}^{-3}$ Température électronique $T_e = 10 \text{ eV} = 116\,050 \text{ K}$ $\varepsilon = 5, 18\,10^{-5}$ Absence d'ionisation (voir Section 4.4.5) Pas d'espace : $\Delta z = \Delta r = 2, 34\,10^{-4} \text{ m}$ Pas de temps : $\Delta t = 9, 45\,10^{-11} \text{ s}$ Nombre de mailles : 11628 Potentiel de l'électrode plasma : $\Phi_c = -39, 86 \text{ V}$ Potentiel sur la frontière d'injection : $\Phi_p = -7, 031 \text{ V}$ Nombre de particules injectées par maille de Γ_p et par pas de temps : $\eta = 10$

A partir de ces paramètres, nous pouvons calculer la distance caractéristique

$$\bar{x} = 0,5859 \text{ m},$$

puis certaines caractéristiques du plasma :

Longueur de Debye : $\lambda_D = 3,035 \, 10^{-5}$ m

Fréquence de collision ionisante : $\nu_{en} = 74\,705\,\mathrm{s}^{-1}$

Densité des neutres : l'approximation des "sphères rigides" donne $\nu_{en} = 10^{-14} n_n$, soit $n_n = 7,47 \, 10^{18} \, \mathrm{m}^{-3}$

La densité de courant injectée est donnée par (Section 2.4.3)

$$J_p = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} D(\sqrt{\Phi_p}) n_0 e \sqrt{\frac{kT_e}{m_i}},$$

^{2.} Les potentiels sont décroissants du plasma jusqu'à l'électrode 4, et croissants entre l'électrode 4 et l'électrode de sortie : on qualifie d'ACCEL-DECEL un tel dispositif, étudié pour permettre la focalisation du faisceau.

soit $J_p = 1445, 8 \,\mathrm{A}\,\mathrm{m}^{-2}$. Le courant qui entre dans le domaine est donc de 321, 8 mA. Par ailleurs, si on néglige les phénomènes 2D, une estimation du courant I_0 qui passe dans le trou de l'électrode plasma est obtenu en multipliant la densité de courant par la surface du trou, ce qui donne $I_0 = 109, 37 \,\mathrm{mA}$.

4.4.4 Résultats de la simulation

La seule différence entre le domaine traité ici et la diode modèle que nous avons considérée jusqu'ici réside dans le traitement de la frontière de sortie, qui était une électrode pleine dans le cas de la diode. Nous avons maintenant une électrode creuse. C'est une situation que nous avons évoquée dans la remarque 2 de la Section 1.5. L'électrode elle-même est traitée comme les autres électrodes (type de frontière Γ_d). Si on note Γ_s la frontière du domaine correspondant au trou, nous proposons de prendre comme condition limite

$$\left\{ \begin{array}{l} \nabla \Phi.\nu_s|_{\Gamma_s}=0\\ f|_{\Gamma s}(v)=0 \text{ pour } v.\nu_s<0 \end{array} \right. ,$$

où ν_s est la normale extérieure à Γ_s . Cela revient à dire qu'il n'y a pas de réémission de particules à droite, et que le champ axial est nul. Prendre un champ E_z nul sur la frontière est une méthode couramment utilisée pour décrire une frontière libre, même si elle est assez grossière. Il serait plus juste de faire une approximation paraxiale [35] en sortie de domaine. Cela consiste à supposer que les dérivées en z sont faibles devant les dérivées en r et d'en déduire une condition limite sur le champ. Cependant, comme nous cherchons surtout à valider l'injection, nous pouvons à l'heure actuelle nous contenter de cette approximation. Intéressons nous maintenant aux résultats de la simulation.

Nous cherchons une solution stationnaire. Pour décider que la solution stationnaire est atteinte, nous disposons à priori de deux critères, illustrés sur la Figure 4.11. Le premier d'entre eux est le nombre de particules contenues dans le domaine : quand un état stationnaire est atteint, il y a autant de particules qui entrent que de particules qui sortent, et donc le nombre de particules se stabilise. Dans cette simulation, le nombre de particules croît pendant environ 8000 itérations, soit pendant environ $0, 8 \mu$ s puis se stabilise autour de 711000 (a). Le second critère est la différence sur le potentiel entre deux itérations. Nous représentons sur la courbe (b) l'erreur relative

$$\sqrt{\sum_{k=0,K+1}\sum_{j=1,J+1}\frac{\left|\left(\Phi_{k,j}^{n+1}\right)^{2}-\left(\Phi_{k,j}^{n}\right)^{2}\right|}{\left(\Phi_{k,j}^{n}\right)^{2}}}$$

Elle se stabilise autour de 10^{-3} au bout d'environ 6000 itérations $(0, 6 \,\mu s)$. Le critère sur le nombre de particules étant le plus restrictif, nous choisissons de nous référer à celui-ci. Dans la suite, les résultats stationnaires seront présentés à l'itération 20000 ($t \simeq 2 \,\mu s$), qui était l'itération maximale retenue pour ce cas. on compte alors 710915 particules dans le domaine. De nombreux diagnostics servent à illustrer ce type de simulations. On peut représenter le potentiel, le champ électrique, la densité de charge ou de courant sur le maillage. Ces deux derniers résultats donnent des indications sur la forme du faisceau en un point quelconque du dispositif. Les positions dans l'espace réel (z, r) ou dans un espace de phase, (r, v_r) par exemple, apportent également des renseignements précieux. Nous donnons dans la suite des éléments d'interprétation de quelques uns de ces diagnostics.

Sur les Figures 4.12 et 4.13, les particules sont représentées ³ dans l'espace (z, r) et colorées en fonction de leur charge (a), du module de leur vitesse (b), de leur vitesse axiale (c) et de leur vitesse radiale (d). Ces résultats permettent de mettre en évidence la focalisation du faisceau au niveau de l'électrode plasma, et l'accélération des particules. Les lignes de potentiel au voisinage de l'électrode plasma sont indiquées sur la Figure 4.14, avec en particulier l'équipotentielle plasma, correspondant au potentiel de l'électrode, $\Phi_p \simeq -40$ V. Cette ligne représente en fait ce qu'on appelle le *ménisque*. C'est la frontière théorique entre le plasma d'un côté et le faisceau de l'autre. Le ménisque est ici légèrement concave, ce qui explique que le faisceau soit initialement convergent (les particules se déplacent perpendiculairement aux lignes de potentiel).

Sur la Figure 4.15, on trace la position des particules à l'itération 1000 (0, 1 μ s, 338000 particules) et à l'itération 5000 (0, 5 μ s, 690000 particules). On se rend compte de l'influence de la charge d'espace dans la focalisation du faisceau : à l'itération 1000, il n'y a pas suffisamment de particules en aval de l'électrode plasma. Ces particules, essentiellement soumises au champ extérieur, se focalisent fortement au niveau de l'électrode 2 (voir numérotation sur la Figure 4.10), puis le faisceau diverge. Au fur et à mesure que le nombre de particules augmente, le champ qu'elles génèrent permet de compenser cette "sur-focalisation". Le faisceau s''élargit et reste concentré. Sa forme est proche de ce que montre la solution stationnaire (Fig. 4.12) qui n'est pas encore atteinte.

Un autre diagnostic utile aux expérimentateurs est le diagramme d'émittance d'un faisceau, qui permet d'en préciser les caractéristiques. Nous avons représenté sur la Figure 4.16, pour différents z, la position des particules dans l'espace $r - \theta$, où θ est l'angle entre l'axe de symétrie du dispositif et la direction de la particule. Ces diagrammes permettent de mesurer la *divergence* du faisceau. On visualise très bien les aberrations dues aux non linéarités (courbures pour les grands r). Ces diagrammes sont tracés au droit de l'électrode plasma (au début (a), au milieu (b) et à la sortie (c) de l'orifice), et sous les autres électrodes ((d) à (g)). Les résultats pour les r négatifs (non calculés) sont tracés par symétrie. La divergence maximale en sortie du dispositif (z = 74 mm est de $6 10^{-2}$ rad. Le diamètre du faisceau est alors de 9,8 mm.

Dans la simulation de référence, le code AXCEL mesure la divergence de sortie en z = 115 mm (Fig. 4.16 -h). Elle est identique à celle que nous trouvons. Le diamètre du faisceau est alors de 14 mm. D'après la Figure 4.9, on peut estimer qu'il est de 9.3 mm en z = 74 mm, ce qui est proche de notre résultat.

^{3.} Dans toutes les graphiques représentant les particules, nous ne traçons qu'une particule sur 10, ce qui explique certains artefacts, uniquement liés à cet échantillonage.

é sur différents plans

Nous représentons ensuite sur la Figure 4.17 le courant mesuré sur différents plans. On vérifie bien la conservation du courant au-delà de l'électrode plasma (a), ce qui est normal puisque le faisceau n'est plus intercepté par aucune électrode. Il subsiste toutefois un problème : le courant que nous mesurons est d'environ 90 mA, ce qui est inférieur aux 109 mA théoriquement attendus. En fait, nous trouvons à l'entrée du trou un courant de l'ordre de 105 mA (b), ce qui est conforme à nos attentes. Les 15 mA qui manquent correspondent en fait à des particules qui ont été absorbées *sous* l'électrode, comme on peut le visualiser sur la Figure 4.18 (représentation des vitesses des particules, zoom sous l'électrode plasma). La trajectoire de ces particules est imposée par la forme des lignes de potentiel autour de l'électrode (Figure 4.14, isopotentiels 10 V et 20 V). Cette perte de courant est clairement liée à la forme rectangulaire que nous avons dû donner à l'électrode plasma est biseautée (donc infiniment mince au niveau du trou), permet de retrouver le courant théorique. Cela illustre bien le fait que la forme des électrodes a une influence capitale sur les caractéristiques du faisceau.

Remarque. On constate que la répartition des particules est très hétérogène, puisque sur les 710915 particules de la simulation, il y en a 534799 en amont de l'électrode plasma (dont 334043 dans la première moitié de la chambre à plasma), et seulement 76116 au-delà. Un tel constat permet d'envisager de nouvelles perspectives de développement. En effet, nous avons dans ce travail utilisé une modélisation entièrement cinétique des ions. Il pourrait être judicieux d'envisager une modélisation hydrodynamique des ions dans une partie du plasma neutre.Cela présenterait un avantage indéniable en terme de temps de calcul et de mémoire utilisée, puisque c'est précisément dans cette zone que l'on rencontre le plus grand nombre de particules. Les difficultés à prévoir résident dans le couplage entre cette méthode fluide et la méthode cinétique Cette dernière reste nécessaire pour décrire correctement les croisements de particules et la formation du faisceau. Il faudrait en particulier définir l'interface entre la "partie fluide" et la "partie cinétique", certainement dépendante du temps, et en calculer la position.

4.4.5 Effet de l'ionisation

Nous avons jusqu'ici étudié un cas sans ionisation. Nous modifions maintenant le cas test en incluant une ionisation de type $\gamma = 1$, c'est-à-dire proportionnelle à la densité électronique. L'ionisation a lieu en amont de l'électrode plasma, et nous ne créons que des particules dont le poids est supérieur à un millième du poids des particules injectées.

Au bout de 20000 itérations, on compte 5500000 particules dans le domaine. Nous comparons sur la Figure 4.19 certains résultats de cette simulation avec le cas sans ionisation (particules bleues sur les diagrammes d'émittance). Le diagramme d'émittance à l'entrée du trou de l'électrode plasma (a) est extrêmement bruité et ne permet pas de distinguer de structure particulière. Toutefois, quand on avance dans le trou (b et c), une structure équivalente à celle du cas sans ionisation émerge. La divergence maximum est plus grande (0,8 rad au lieu de 0,4), mais seul un petit nombre de particules est concerné. Ces différences se sont estompées sur l'émittance mesurée à la sortie du domaine (d). Par ailleurs, on mesure le même courant de sortie dans les deux cas (e).

Nous pouvons proposer l'explication suivante : pour savoir s'il y a effectivement des collisions ionisantes, il faut comparer les dimensions du domaine en amont de l'électrode plasma avec le libre parcours moyen des électrons, donné par

$$\Lambda = \frac{v_e}{\nu} = \frac{1}{\nu} \sqrt{\frac{kT_e}{m_e}}$$
$$= \bar{x} \sqrt{\frac{m_e}{2m_i}}$$
$$= 9,37 \, 10^{-3} \, \mathrm{m},$$

La taille du domaine d'ionisation est ici de $30 \Delta z = 7 \, 10^{-3} \,\mathrm{m}$, légèrement inférieure au libre parcours moyen des électrons, ce qui peut justifier l'absence d'influence de l'ionisation visible sur les cas tests.

Remarque. Ce genre de cas illustre la nécessité d'utiliser la technique de coalescence, si on veut que les simulations puissent s'effectuer dans des temps raisonnables, et en utilisant des capacités mémoires raisonnables : pour le cas avec ionisation, les tableaux sur les particules, de type réels, représentent 110 Mo (contre 279 ko pour les quantités calculées aux nœuds).

4.5 Conclusion

Ce chapitre a permis de valider la méthode de simulation, modèle d'extraction + code particulaire. Nous avons tout d'abord considéré des situations simples, en vérifiant en particulier l'efficacité de la correction de l'injection des particules. Un cas test plus réaliste a ensuite été défini en se référant à la source d'ions SILHI. Du fait de l'utilisation d'un maillage structuré, il a fallu simplifier la forme des électrodes. Si tous les résultats de la simulation de référence n'ont pas été reproduits, nous avons justifié que cela provenait de cette simplification. Nous avons toutefois retrouvé le même courant injecté Si on ne retrouve pas exactement les mêmes résultats, nous avons vérifié que cela provenait de la simplification de la forme des électrodes, nécessaire dans la mesure où l'on travaille sur un et la même forme de faisceau à la sortie du dispositif. Pour ce cas test, la prise en compte de l'ionisation dans la gaine n'est pas nécessaire. La simulation avec ionisation montre malgré tout l'intérêt d'étudier les méthodes de coalescence.



FIGURE 4.9 - Cas de référence : domaine et profil du faisceau, simulation "AXCEL"



FIGURE 4.10 - Caractéristiques de la simulation : dimensions et potentiels.



FIGURE 4.11 – critères de convergence : nombre de particules et erreur sur le potentiel.



FIGURE 4.12 - Représentation des particules dans l'espace <math>(x, y), charge (a) et norme de la vitesse (b).



FIGURE 4.13 – représentation des particules dans l'espace (x, y), vitesses axiale (c) et radiale (d).



FIGURE 4.14 – Lignes de potentiel au voisinage de l'électrode plasma.



FIGURE 4.15 – Effet de la charge d'espace sur la forme du faisceau.



FIGURE 4.16 – Diagramme d'emittance radiale pour différents z. Colonne de gauche : résultats a, b, c, h. Colonne de droite : résultats d, e, f, g.



FIGURE 4.17 – Mesure du courant au cours du temps.



FIGURE 4.18 – Absorption de particules sous l'électrode.



FIGURE 4.19 - Effet de l'ionisation.

Conclusion et perspectives

Cette thèse a été initiée à la suite d'une précédente thèse réalisée au C.E.A par B. Bodin [5] qui introduisait une modélisation de l'extraction d'un faisceau d'ions fondée sur la notion de surface libre. La gaine était réduite à une surface équipotentielle d'où les ions sont extraits suivant une loi de Child-Langmuir. Dans ce travail, on négligeait l'ionisation dans la gaine et on ne considérait que le cas d'une surface libre (ou ménisque) convexe. Notre but était de déterminer un modèle d'extraction adaptée à la source d'ions de TRISPAL pour laquelle le ménisque est nécessairement concave et d'aboutir à un code numérique susceptible de déterminer les caractéristiques du faisceau d'ions.

Nous avons mis au point un modèle d'extraction qui repose sur la définition d'une frontière émissive située dans le plasma neutre et la résolution auto-consistante du système de Vlasov-Poisson, fortement non linéaire. Lors d'une étude préalable unidimensionnelle, la résolution d'un problème de Poisson non linéaire et la détermination de la solution analytique de l'équation de Vlasov dans le cadre d'une hypothèse de quasi-neutralité ont permis de calculer les valeurs du potentiel et de la fonction de distribution ionique sur cette frontière. La vérification de l'hypothèse de quasi-neutralité dicte le choix de la position de la frontière, située à quelques dizaines de longueur de Debye de l'électrode plasma. Cette méthode revient à définir de manière auto-consistante la forme et la position du ménisque en fonction des caractéristiques du plasma. Le fait de se donner une frontière artificielle dans le plasma plutôt que de la relier au ménisque permet de préciser une fois pour toute sa position, et évite la mise au point d'algorithmes complexes de suivi d'interface. Un modèle simple d'ionisation nous a permis de vérifier que l'ionisation dans la gaine pouvait être négligée dans certains cas.

Pour la résolution du système de Vlasov-Poisson, nous avons utilisé une méthode particulaire instationnaire couplée à une approximation par différences finies. Une technique d'injection de particules permettant de supprimer les particules les plus lentes a été développée pour discrétiser la fonction de distribution sur la frontière d'émission. La non linéarité de l'équation de Poisson a été traitée par un algorithme itératif de Newton. A chaque itération, une méthode de gradient conjugué préconditionné, également itératif est utilisé pour résoudre l'équation linéaire.

Devant le nombre très important de particules dans certaines simulations, nous avons été amenés à proposer une technique de coalescence fondée sur la conservation du poids, de la vitesse et de l'énergie des particules ainsi que de la densité aux nœuds afin de limiter le nombre de particules. Ce procédé induit un bruit numérique important, du fait de la présence dans chaque maille de particules de poids très différents, mais l'essentiel des phénomènes physiques est néanmoins préservé. Les deux problèmes unidimensionnels que nous avons résolus nous ont fourni un premier moyen de validation de la méthode d'injection et de la résolution numérique. A titre d'application et de validation, nous avons abordé le problème de l'optimisation de faisceau à l'aide du code de simulation PIC 2D axisymétrique que nous avons élaboré. Du fait de l'adimensionnement des équations, cette optimisation peut être effectuée par une étude paramétrique sur les variations d'un paramètre qui dépend des caractéristiques du plasma source. Si nous n'avons pas exactement retrouvé les résultats des expériences et ceux de simulations numériques réalisées à l'aide d'un code industriel, nous avons établi que la différence entre ces résultats et ceux de nos simulations numériques provenait d'une simplification excessive des électrodes d'extraction, et non de la méthode d'injection ellemême.

Cette constatation nous ouvre une perspective immédiate : il s'agit d'intégrer notre procédure d'injection à un code plus élaboré, tel que le code M2V du Service de Physique des Plasmas et d'Electromagnétisme. Ce code, qui peut résoudre le système de Vlasov-Poisson sur des maillages non structurés, doit permettre de modéliser les formes d'électrodes complexes que l'on trouve dans les systèmes d'extraction, et ainsi de retrouver réellement les résultats passés. Il sera alors possible de réaliser une étude paramétrique poussée de manière à optimiser les propriétés physiques et géométriques du faisceau. Dans l'optique d'une utilisation intensive d'un code basé sur notre modèle d'injection, la vitesse de calcul est un élément important.

Nous avons établi que le temps de calcul est fortement grevé par le nombre important de particules situées dans la chambre à plasma. Une modélisation hydrodynamique de cette zone, conduisant à une résolution plus rapide, peut être envisagée puisqu'une part importante de la chambre à plasma ne connaît pas de phénomènes transverses. Dans ce cas, il faut prévoir un couplage entre cette méthode hydrodynamique et la méthode cinétique qui reste nécessaire au-delà de la gaine, définir une interface entre les modélisation et être capable de calculer sa position au cours du temps. Des travaux allant dans ce sens ont été entrepris au laboratoire de Los Alamos, et peuvent donner des premières pistes [32][33].

Il serait intéressant de dériver de notre étude un modèle d'injection adapté à plusieurs espèces ioniques. Dans ce cas, on peut également déterminer une forme analytique des fonctions de distributions ioniques, semblables à celle que nous avons trouvée. La première difficulté qui apparaît est le calcul à partir de ces distributions des densités de courant nécessaires au calcul des poids des particules [10].

On peut également prévoir l'amélioration de la procédure de coalescence pour pouvoir l'adapter à des problèmes qui font intervenir des champs magnétiques, ce qui nécessiterait, outre la conservation de la densité aux nœuds, celle de la densité de courant.

Nous terminons en disant que si, à l'origine, ces travaux était directement liés au projet TRISPAL, les éléments qui ont été développés peuvent être appliqués à d'autres études. La technique d'injection des particules n'étant pas lié à la position ou à la forme du ménisque, on peut l'adapter à d'autres sources d'ions, de même que la méthode de coalescence peut avoir d'autres applications, au-delà de la physique des faisceaux.

Deuxième partie

Modélisation d'un plasma d'anode

Notations employées dans la seconde partie

L'indice α désigne une espèce de particule. Les quantités se rapportant aux ions, aux électrons et aux neutres sont indicés respectivement par i, e, a. Sauf exception signalée, les unités utilisées sont celles du Système International.

Constantes physiques

- e : charge de l'électron.
- k : constante de Boltzmann
- h : constante de Planck
- m_i : masse du proton
- m_e : masse de l'électron
- ε_{ion} : énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène

Symboles

 \mathbf{J}_0 : densité du courant extérieur, $\alpha = \frac{m_i}{e} \mathbf{J}_0$

E : champ électrique.

 $n_{\alpha},\,\rho_{\alpha}$: densité, densité de masse pour l'espèce α

 $p_{\alpha}, T_{\alpha}, \mathbf{u}_{\alpha}, W_{\alpha}$: pression, température, vitesse, énergie totale pour l'espèce α

 $\mathbf{C}_{\alpha,\beta}, D_{\alpha,\beta}$: termes de collisions en entre les particules α et β

 $\nu_{\alpha,\beta}, \Omega_{\alpha,\beta}$: fréquences de collisions associées à ces termes

 K_{ion}, K_{rec} : coefficients d'ionisation et de recombinaison

- γ : rapport des chaleurs spécifiques
- λ_D : longueur de Debye

 x_l : position de l'interface entre la zone de chauffage et la zone d'expansion du plasma

U, **F** : inconnue et flux d'un système hyperbolique écrit sous forme conservative

 \mathcal{U} : inconnue d'un système hyperbolique écrit sous forme non conservative

Y: fonction de Heaviside
Chapitre 5

Etablissement des modèles et propriétés

5.1 Introduction

Le but de cette partie est de proposer une modélisation de la formation et de la détente d'un plasma créé au voisinage d'une anode par un courant extérieur. En suivant la nomenclature exposée dans l'introduction générale (page 15), le domaine d'étude recouvre les trois zones suivantes :

- *zone d'ionisation* (2) : ionisation et dissociation de l'hydrogène moléculaire, sous l'action du faisceau d'électrons.
- zone de chauffage (3) : chauffage résistif du plasma totalement ionisé.
- *zone d'expansion* (4) : détente libre du plasma dans le vide, découplée de la décharge.



FIGURE 5.1 – Rappel du découpage du domaine d'étude.

En amont de ce domaine, des conditions limites sont données à l'interface entre l'anode (zone 1) et la zone d'ionisation. Le plasma se détend sans contrainte en aval du domaine.

Nous commençons par présenter un modèle susceptible de décrire la création et l'expansion du plasma (Section 5.2). Nous le qualifions de modèle global dans la mesure où il doit être valable sur l'ensemble du domaine d'étude, et par opposition au modèle simplifié présenté par la suite. Nous examinons d'un point de vue mathématique le système ainsi obtenu, en montrant qu'il est possible de l'écrire sous forme conservative dans une formulation en entropie. Nous constatons également que l'hyperbolicité du système n'est pas toujours assurée, ce qui laisse présager de difficultés numériques lors de la résolution. Nous présentons ensuite un modèle plus simple, limité à un plasma entièrement ionisé (Section 5.3). Ce modèle, dérivé du modèle global, permet de décrire le chauffage et la propagation du plasma (restriction aux zones 3 et 4). Il présente en outre des propriétés mathématiques semblables à celles du modèle global, et nous servira donc à illustrer la résolution numérique dans le chapitre suivant.

5.2 Modèle global

Le courant établi entre les deux électrodes rejoint l'anode en un point quelconque. Des ions y sont alors formés, ce qui tend à attirer les électrons du courant autour du point d'impact initial. La surface affectée par le courant, appelée 'spot anodique'¹, se stabilise. Son aire, notée S, est estimée expérimentalement.



FIGURE 5.2 – Définition de la densité de courant extérieur.

Nous supposons que le courant a atteint un régime stationnaire ; son intensité I, est constante. Ces deux grandeurs étant données, on en déduit la densité du courant extérieur à l'interface anode/plasma :

$$\mathbf{J}_0^0 = \frac{1}{\mathcal{S}}\mathbf{I}.$$

A partir de là, la densité du courant extérieur \mathbf{J}_0 est définie comme une fonction dépendant de la position, et vérifiant $\mathbf{J}_0 = \mathbf{J}_0^0$ sur l'interface. C'est cette quantité qui permettra de quantifier les influences extérieurs sur le plasma (chauffage).

Nous adoptons une modélisation hydrodynamique du plasma (dense). Nous considérons un plasma partiellement ionisé formé de trois populations de particules : les électrons (indicés par e), les ions (i), et des neutres (a). Les ions sont simplement chargés, de sorte que

$$q_e = -e \qquad q_i = e \qquad q_a = 0.$$

^{1.} De la même façon, un 'spot cathodique' se forme à l'autre extrémité du faisceau d'électrons [49].

Chaque espèce α est caractérisée par sa densité n_{α} , sa masse m_{α} , sa température T_{α} , sa pression p_{α} , sa vitesse \mathbf{u}_{α} et sa densité d'énergie W_{α} . Pour un gaz monoatomique, le rapport des chaleurs spécifiques est $\gamma = \frac{5}{3}$; on note k la constante de Boltzmann.

5.2.1Lois de conservation

Ecrivons pour chaque espèce α , sous forme différentielle, les lois de conservation de la densité

$$\frac{\partial n_{\alpha}}{\partial t} + \nabla .(n_{\alpha} \mathbf{u}_{\alpha}) = \left(\frac{\partial n_{\alpha}}{\partial t}\right)_{ion},\tag{5.1}$$

de la quantité de mouvement

$$m_{\alpha}\{\frac{\partial}{\partial t}(n_{\alpha}\mathbf{u}_{\alpha}) + \nabla .(n_{\alpha}\mathbf{u}_{\alpha}\otimes\mathbf{u}_{\alpha})\} + \nabla p_{\alpha} = q_{\alpha}n_{\alpha}\mathbf{E} + \sum_{\beta\neq\alpha}\mathbf{C}_{\alpha\beta}, \quad (5.2)$$

et de l'énergie

$$\frac{\partial W_{\alpha}}{\partial t} + \nabla .((W_{\alpha} + p_{\alpha})\mathbf{u}_{\alpha}) = q_{\alpha}n_{\alpha}\mathbf{u}_{\alpha}.\mathbf{E} + \sum_{\beta \neq \alpha} D_{\alpha\beta},$$
(5.3)

avec la relation de fermeture

$$p_{\alpha} = n_{\alpha} k T_{\alpha}. \tag{5.4}$$

Dans (5.2) et (5.3), **E** désigne le champ électrique.

ns (5.2) et (5.3), **E** designe le champ crossique. Les collisions sont prises en compte dans le second membre de l'équation (5.1), $\left(\frac{\partial n_{\alpha}}{\partial t}\right)_{ion}$ étant le taux de variation de la densité des particules de l'espèce α dû à la réaction d'ionisation et de recombinaison

$$e + a \rightleftharpoons 2e + i,\tag{5.5}$$

D'autre part, les termes $\mathbf{C}_{\alpha\beta}$ et $D_{\alpha\beta}$ dans les équations (5.2) et (5.3) traduisent respectivement l'échange de quantité de mouvement et l'échange d'énergie du fait des collisions $\alpha - \beta$. Ces termes seront explicités plus loin. Ils vérifient

$$\mathbf{C}_{\alpha\beta} = -\mathbf{C}_{\beta\alpha},$$
$$D_{\alpha\beta} = -D_{\beta\alpha}.$$

En choisissant d'associer l'énergie d'ionisation ε_{ion} à l'énergie électronique, nous écrivons

$$W_{\alpha} = \begin{cases} n_e \left(\frac{kT_e}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} m_e \left| \mathbf{u}_e \right|^2 + \varepsilon_{ion} \right), \alpha = e \\ n_{\alpha} \left(\frac{kT_{\alpha}}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} m_{\alpha} \left| \mathbf{u}_{\alpha} \right|^2 \right), \alpha = i, a. \end{cases}$$

En outre, en l'absence de champ magnétique, les densités ioniques et électroniques sont reliées au champ électrique par l'équation de Poisson,

$$\nabla \mathbf{E} = \frac{e}{\varepsilon_o} (n_i - n_e)$$

Comme dans la première partie, on a $\mathbf{E} = -\nabla \Phi$, et l'équation de Poisson s'écrit

$$-\Delta \Phi = \frac{e}{\varepsilon_o} (n_i - n_e).$$

On adimensionne cette équation, en notant L la taille du domaine et en considérant les grandeurs caractéristiques

$$\begin{cases} \bar{\Phi} = \frac{e}{kT_e} \\ \bar{x} = L \\ \bar{n} = n_a. \end{cases}$$

Contrairement à la situation envisagée dans la Première Partie (Section 1.4), on connaît ici la dimension du domaine d'étude, ce qui permet de prendre $\bar{x} = L$. En désignant de façon générique par A' la variable adimensionnée associée à la variable réelle A et vérifiant $A = A'\bar{A}$, l'équation de Poisson s'écrit

$$n'_i - n'_e = \frac{1}{L^2} \frac{kT_e \varepsilon_0}{e^2 n_a(0)} \Delta' \Phi' = \left(\frac{\lambda_D}{L}\right)^2 \Delta' \Phi',$$

d'où, en enlevant les ',

$$\left(\frac{\lambda_D}{L}\right)^2 \Delta \Phi = n_i - n_e,\tag{5.6}$$

où λ_D désigne la longueur de Debye. Nous allons maintenant faire plusieurs hypothèses de façon à simplifier ce modèle. On considère tout d'abord que

(i) les dimensions du domaine et les caractéristiques du plasma (densité, température) impliquent que

$$\lambda_D \ll L.$$

En supposant que le potentiel ne varie pas trop fortement, cette hypothèse et l'équation de Poisson (5.6) permettent de considérer que

(ii) le plasma est quasi-neutre, de densité

$$n_e = n_i = n. \tag{5.7}$$

Nous supposons également que

(iii) la densité de courant \mathbf{J} du plasma est donnée égale à \mathbf{J}_0 , c'est-à-dire

$$\mathbf{J} = e(n_i \mathbf{u}_i - n_e \mathbf{u}_e) = en(\mathbf{u}_i - \mathbf{u}_e) = \mathbf{J}_0,$$
(5.8)

ce qui revient à négliger le courant interne du plasma devant le courant extérieur.

(iv) Les ions et les atomes neutres se comportent comme un même fluide, i.e.

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_a = \mathbf{u},$$

$$T_i = T_a = T.$$
(5.9)

Pour faire cette hypothèse, nous supposons que les ions créés à partir des atomes ont la même vitesse et la même température qu'eux, et que les effets du champ électrique ne sont pas suffisants pour ensuite différencier les ions des atomes. (v) Nous supposons que l'inertie des électrons est faible, c'est-à-dire que les termes convectifs dans l'équation de conservation de la quantité de mouvement des électrons sont négligés, et que l'énergie cinétique des électrons est négligée devant leur énergie potentielle.

Nous allons maintenant réécrire les équations de conservation en fonction de ces hypothèses.

Conservation de la densité

Les taux de variation des densités ionique et électronique sont identiques et vérifient

$$\left(\frac{\partial n_e}{\partial t}\right)_{ion} = \left(\frac{\partial n_i}{\partial t}\right)_{ion} = \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{ion} = K_{ion}nn_a - K_{rec}n^3 \tag{5.10}$$

où K_{ion} et K_{rec} sont respectivement les coefficients d'ionisation et de recombinaison de la réaction (5.5) [44]. De plus, la variation des neutres est l'inverse de celle des particules chargées :

$$\left(\frac{\partial n_a}{\partial t}\right)_{ion} = -\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{ion}$$

En tenant compte de l'hypothèse (5.7), les équations de conservation de la densité s'écrivent donc

$$\begin{aligned} \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla .(n\mathbf{u}_e) &= \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{ion},\\ \frac{\partial n}{\partial t} + \nabla .(n\mathbf{u}) &= \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{ion},\\ \frac{\partial n_a}{\partial t} + \nabla .(n_a\mathbf{u}) &= -\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{ion}\end{aligned}$$

On en déduit que

$$\frac{\partial}{\partial t}(n+n_a) + \nabla .((n+n_a)\mathbf{u}) = 0, \qquad (5.11)$$

et d'autre part, avec l'hypothèse (5.8), que

$$\nabla J_0 = 0. \tag{5.12}$$

On complète alors les équations (5.11) et (5.12) par

$$\frac{\partial n_a}{\partial t} + \nabla (n_a \mathbf{u}) = K_{ion} n n_a - K_{rec} n^3.$$
(5.13)

Les équations de conservation de la densité se réduisent donc aux équations (5.11), (5.12) et (5.13).

Conservation de la quantité de mouvement

Compte tenu des hypothèses (ii), (iv) et (v), les équations (5.2) et (5.4) donnent

$$\nabla p_e = -en\mathbf{E} + \mathbf{C}_{ei} + \mathbf{C}_{ea}, \qquad (5.14)$$
$$m_i \{ \frac{\partial}{\partial t} (n\mathbf{u}) + \nabla . (n\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \} + \nabla p_i = en\mathbf{E} + \mathbf{C}_{ie} + \mathbf{C}_{ia}, \\m_a \{ \frac{\partial}{\partial t} (n_a \mathbf{u}) + \nabla . (n_a \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \} + \nabla p_a = \mathbf{C}_{ae} + \mathbf{C}_{ai}.$$

Puisque $m_e \ll m_a$, la masse des ions est sensiblement égale à la masse des atomes d'hydrogène, soit $m_i \simeq m_a$. En sommant les équations relatives aux "lourds" (les ions et les neutres), on obtient

$$m_i\{\frac{\partial}{\partial t}((n_a+n)\mathbf{u}) + \nabla .((n_a+n)\mathbf{u}\otimes\mathbf{u})\} + \nabla p = en\mathbf{E} - \mathbf{C}_{ei} - \mathbf{C}_{ea},$$
(5.15)

en posant

$$p = p_a + p_i = (n + n_a)kT.$$
(5.16)

Si on somme les équations (5.14) et (5.15) on trouve que

$$m_i\{\frac{\partial}{\partial t}((n_a+n)\mathbf{u}) + \nabla .((n_a+n)\mathbf{u}\otimes\mathbf{u})\} + \nabla (p_e+p) = \mathbf{0},$$
(5.17)

Les équations de conservation de la quantité de mouvement se réduisent ainsi aux équations (5.14), (5.15), 5.16) ou encore de façon équivalente aux équations (5.14), (5.16), (5.17).

Conservation de l'énergie

L'hypothèse (5.8) sur le courant permet d'exprimer la vitesse électronique en fonction de celle des lourds,

$$\mathbf{u}_e = \mathbf{u} - \frac{1}{en} \mathbf{J}_0,\tag{5.18}$$

et l'hypothèse (v) permet de négliger l'énergie cinétique des électrons devant leur énergie potentielle et l'énergie d'ionisation, soit

$$W_e = n_e \left(\frac{kT_e}{\gamma - 1} + \varepsilon_{ion} \right).$$

En vertu de (5.14), l'équation de conservation de l'énergie des électrons devient

$$\frac{\partial W_e}{\partial t} + \nabla .((W_e + p_e)\mathbf{u}_e) = \mathbf{u}_e \nabla p_e + D_{ei} - \mathbf{u}_e .\mathbf{C}_{ei} + D_{ea} - \mathbf{u}_e .\mathbf{C}_{ea}.$$
(5.19)

En sommant les équations de conservation de l'énergie relatives aux lourds et en utilisant (5.14), on obtient

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla .((W+p)\mathbf{u}) = -\mathbf{u}\nabla p_e - (D_{ei} + D_{ea} - \mathbf{u}.(\mathbf{C}_{ei} + \mathbf{C}_{ea}))$$
(5.20)

avec

$$W = W_i + W_a = (n + n_a) \left(\frac{kT}{\gamma - 1} + \frac{1}{2} m_i |\mathbf{u}|^2 \right).$$

Les équations de conservation de l'énergie sont donc équivalentes aux équations (5.19) et (5.20) où \mathbf{u}_e est donnée par (5.18). Les équations (5.19) et (5.20) ne sont pas conservatives.

Avant d'aller plus loin, explicitons les termes de collisions, qui n'interviennent plus que dans la conservation de l'énergie. De manière générale [12], $\mathbf{C}_{\alpha,\beta}$ et $D_{\alpha\beta}$ sont respectivement de la forme

$$\mathbf{C}_{\alpha\beta} = -m_{\alpha}n_{\alpha}\nu_{\alpha\beta}(\mathbf{u}_{\alpha} - \mathbf{u}_{\beta})$$

 et

$$D_{\alpha\beta} = -m_{\alpha}n_{\alpha}\nu_{\alpha\beta}\frac{m_{\alpha}\mathbf{u}_{\alpha} + m_{\beta}\mathbf{u}_{\beta}}{m_{\alpha} + m_{\beta}}.(\mathbf{u}_{\alpha} - \mathbf{u}_{\beta}) - \frac{n_{\alpha}\Omega_{\alpha\beta}k}{\gamma - 1}(T_{\alpha} - T_{\beta}),$$

Les termes $\nu_{\alpha\beta}$ et $\Omega_{\alpha\beta}$ sont des fréquences de collision $\alpha - \beta$ qui vérifient les relations

$$\left\{ \begin{array}{l} \Omega_{ei} = 2 \frac{m_e}{m_i} \nu_{ei} \\ \Omega_{ea} = 2 \frac{m_e}{m_a} \nu_{ea} \end{array} \right.$$

.

 et

$$m_{\alpha}n_{\alpha}\nu_{\alpha\beta} = m_{\beta}n_{\beta}\nu_{\beta\alpha},$$
$$n_{\alpha}\Omega_{\alpha\beta} = n_{\beta}\Omega_{\alpha\beta}.$$

En supposant, et c'est ce qui sera fait dans la suite, que

$$\frac{m_e}{m_i} \left| \mathbf{u}_e \right| \ll \left| \mathbf{u} \right|, \tag{5.21}$$

on obtient en particulier

$$D_{e\beta} = -m_e n \nu_{e\beta} \mathbf{u}.(\mathbf{u}_e - \mathbf{u}) - \frac{n \Omega_{e\beta} k}{\gamma - 1} (T_e - T)$$
$$= \mathbf{u}.\mathbf{C}_{e\beta} - \frac{n \Omega_{e\beta} k}{\gamma - 1} (T_e - T).$$

On trouve ainsi

$$\mathbf{C}_{ei} + \mathbf{C}_{ea} = -m_e n(\nu_{ei} + \nu_{ea})(\mathbf{u}_e - \mathbf{u}), \qquad (5.22)$$

$$D_{ei} + D_{ea} - \mathbf{u}.(\mathbf{C}_{ei} + \mathbf{C}_{ea}) = -\frac{nk}{\gamma - 1}(\Omega_{ei} + \Omega_{ea})(T_e - T).$$
(5.23)

En utilisant ces deux dernières relations, l'équation de conservation (5.19) devient

$$\frac{\partial W_e}{\partial t} + \nabla .((W_e + p_e)\mathbf{u}_e) - \mathbf{u}_e . \nabla p_e = (\mathbf{u} - \mathbf{u}_e) .(\mathbf{C}_{ei} + \mathbf{C}_{ea}) - \frac{nk}{\gamma - 1}(\Omega_{ei} + \Omega_{ea})(T_e - T),$$

solt

$$\frac{\partial W_e}{\partial t} + \nabla .((W_e + p_e)\mathbf{u}_e) - \mathbf{u}_e . \nabla p_e = \underbrace{-m_e n(\nu_{ei} + \nu_{ea}) |\mathbf{u}_e - \mathbf{u}|^2}_{\gamma - 1} - \underbrace{\frac{nk}{\gamma - 1}(\Omega_{ei} + \Omega_{ea})(T_e - T)}_{\gamma - 1}.$$

Les termes sources de cette équation sont de deux types : le premier terme est identifiable à un chauffage par effet Joule tandis que le deuxième est un terme de relaxation vers l'équilibre thermique.

L'équation (5.20) sur les lourds donne quant à elle

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla .((W+p)\mathbf{u}) + \mathbf{u} . \nabla p_e = \frac{nk}{\gamma - 1} (\Omega_{ei} + \Omega_{ea})(T_e - T),$$

avec uniquement le terme de relaxation au second membre.

La différence de la nature des seconds membres de ces deux équations rend compte du fait que ce sont les électrons qui sont chauffés par le courant extérieur. L'énergie qu'ils reçoivent ainsi est ensuite transférée aux lourds par l'intermédiaire des termes de relaxation.

Bilan : système de lois de conservation

En remplaçant \mathbf{u}_e par sa valeur tirée de (5.18), on ferme le système de lois de conservation et on obtient finalement le modèle à deux températures :

$$\begin{cases}
\frac{\partial}{\partial t}(n+n_{a}) + \nabla .((n+n_{a})\mathbf{u}) = 0 \\
\frac{\partial n_{a}}{\partial t} + \nabla .(n_{a}\mathbf{u}) = K_{ion}nn_{a} - K_{rec}n^{3} \\
m_{i}\{\frac{\partial}{\partial t}((n_{a}+n)\mathbf{u}) + \nabla .((n_{a}+n)\mathbf{u}\otimes\mathbf{u})\} + \nabla (p_{e}+p) = \mathbf{0} \\
\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla .((W+p)\mathbf{u}) + \mathbf{u}.\nabla p_{e} = \frac{nk}{\gamma-1}(\Omega_{ei}+\Omega_{ea})(T_{e}-T) \\
\frac{\partial W_{e}}{\partial t} + \nabla .\left((W_{e}+p_{e})(\mathbf{u}-\frac{\mathbf{J}_{0}}{en})\right) - (\mathbf{u}-\frac{\mathbf{J}_{0}}{en}).\nabla p_{e} = \frac{m_{e}}{e^{2}}\frac{\nu_{ei}+\nu_{ea}}{n}|\mathbf{J}_{0}|^{2} - \frac{nk}{\gamma-1}(\Omega_{ei}+\Omega_{ea})(T_{e}-T).
\end{cases}$$
(5.24)

Le système (5.24) est complété par les "équations d'état"

$$\begin{cases} p_e = nkT_e, \quad p = (n+n_a)kT \\ W = (n+n_a)\left(\frac{kT}{\gamma-1} + \frac{1}{2}m_a |\mathbf{u}|^2\right) \\ W_e = n_e\left(\frac{kT_e}{\gamma-1} + \varepsilon_{ion}\right). \end{cases}$$
(5.25)

Remarque. L'équation de conservation de la quantité de mouvement des électrons, (5.14) ainsi que l'équation (5.22) permettent d'exprimer le champ électrique sous la forme

$$\mathbf{E} = \frac{1}{en} \left(\mathbf{C}_{ei} + \mathbf{C}_{ea} - \nabla p_e \right) = \frac{1}{en} \left(m_e n (\nu_{ei} + \nu_{ea}) (\mathbf{u} - \mathbf{u}_e) - \nabla p_e \right),$$

c'est-à-dire

$$\mathbf{E} = \frac{m_e(\nu_{ei} + \nu_{ea})}{e^2 n} \mathbf{J}_o - \frac{1}{en} \nabla p_e.$$

5.2.2 Hyperbolicité du modèle

Ecriture du modèle en variables $\mathcal{U} = (n + n_a, n_a, \mathbf{u}, p_e, p)$

Nous allons maintenant examiner les propriétés d'hyperbolicité du modèle (5.24), (5.25). Il est alors agréable de travailler avec le système en variables p et p_e , qui possède les mêmes propriétés que le système en variables W et W_e .

Compte tenu de la première équation de (5.24), on a

$$\frac{\partial}{\partial t}((n+n_a)\mathbf{u}) + \nabla .((n+n_a)\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) = (n+n_a)(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}\nabla .\mathbf{u}),$$

de sorte que la troisième équation de (5.24) devient

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}\nabla \cdot \mathbf{u} + \frac{1}{m_i(n+n_a)}\nabla(p+p_e) = \mathbf{0}.$$
(5.26)

Passons à l'équation de conservation de l'énergie des électrons (5.19). On note que

$$W_e = \frac{1}{\gamma - 1} p_e + n \varepsilon_{ion},$$

si bien que

$$\frac{\partial W_e}{\partial t} + \nabla .((W_e + p_e)\mathbf{u}_e) - \mathbf{u}_e . \nabla p_e = \frac{1}{\gamma - 1} (\frac{\partial p_e}{\partial t} + \mathbf{u}_e . \nabla p_e) + \frac{\gamma}{\gamma - 1} p_e \nabla . \mathbf{u}_e + \varepsilon_{ion} (\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla . (n\mathbf{u}_e)).$$

Il en découle que l'équation (5.19) s'écrit

$$\frac{\partial p_e}{\partial t} + \mathbf{u}_e \cdot \nabla p_e + \gamma p_e \nabla \cdot \mathbf{u}_e = \mathcal{S}_e$$

l'équation (5.1) permettant d'exprimer le second membre sous la forme

$$\mathcal{S}_e = (\gamma - 1) \left(D_{ei} + D_{ea} - \mathbf{u}_e \cdot (\mathbf{C}_{ea} + \mathbf{C}_{ei}) - \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{ion} \varepsilon_{ion} \right).$$

En exprimant les termes de collision en fonction de leurs valeurs établies dans la section précédente, il est équivalent d'écrire que

$$S_e = (\gamma - 1) \left(\frac{m_e}{e^2} \frac{\nu_{ei} + \nu_{ea}}{n} |\mathbf{J}_0|^2 + \varepsilon_{ion} \left(K_{rec} n^3 + K_{ion} n n_a \right) \right) - nk(\Omega_{ei} + \Omega_{ea})(T_e - T).$$

Il reste à transformer la quatrième équation (ou équation de conservation de l'énergie des lourds), avec

$$W = \frac{1}{\gamma - 1}p + \frac{1}{2}(n + n_a)m_i |\mathbf{u}|^2.$$

On a d'une part

$$\frac{\partial W}{\partial t} = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{\partial p}{\partial t} + \frac{1}{2} m_i \left| \mathbf{u} \right|^2 \frac{\partial}{\partial t} (n + n_a) + (n + n_a) m_i \mathbf{u} \cdot \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t},$$

et d'autre part

$$(W+p)\mathbf{u} = \frac{\gamma}{\gamma-1}p\mathbf{u} + \frac{1}{2}m_i(n+n_a)\mathbf{u} |\mathbf{u}|^2,$$

 soit

$$\nabla .((W+p)\mathbf{u}) = \frac{\gamma}{\gamma - 1} \nabla .(p\mathbf{u}) + \frac{1}{2} m_i |\mathbf{u}|^2 \nabla .((n+n_a)\mathbf{u}) + m_i(n+n_a)\mathbf{u}.(\mathbf{u}\nabla .\mathbf{u}).$$

On en déduit

$$\begin{split} \frac{\partial W}{\partial t} + \nabla .((W+p)\mathbf{u}) + \mathbf{u}.\nabla p_e &= \frac{1}{\gamma - 1}\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\gamma}{\gamma - 1}\nabla .\left(p\mathbf{u}\right) + \\ &+ \frac{1}{2}m_i \left|\mathbf{u}\right|^2 \left(\frac{\partial}{\partial t}(n + n_a) + \nabla .((n + n_a)\mathbf{u})\right) + \\ &+ (n + n_a)m_i\mathbf{u}.\left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}\nabla .\mathbf{u}\right) + \mathbf{u}.\nabla p_e \end{split}$$

c'est-à-dire, en utilisant (5.11) et (5.26),

$$\begin{split} \frac{\partial W}{\partial t} + \nabla.((W+p)\mathbf{u}) + \mathbf{u}.\nabla p_e &= \frac{1}{\gamma-1}\frac{\partial p}{\partial t} + \frac{\gamma}{\gamma-1}\nabla.\left(p\mathbf{u}\right) \\ &- \mathbf{u}.\nabla(p+p_e) + \mathbf{u}.\nabla p_e \end{split}$$

d'où finalement

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \nabla .((W+p)\mathbf{u}) + \mathbf{u}.\nabla p_e = \frac{1}{\gamma - 1}(\frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla p) + \frac{\gamma}{\gamma - 1}p\nabla .\mathbf{u}.$$

Ainsi l'équation de conservation de l'énergie des lourds (5.20) devient

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla p + \gamma p \nabla \cdot \mathbf{u} = \mathcal{S},$$

avec

$$\mathcal{S} = -(\gamma - 1)(D_{ei} + D_{ea} - \mathbf{u}.(\mathbf{C}_{ei} + \mathbf{C}_{ea}))$$

ou, de manière équivalente avec (5.23),

$$\mathcal{S} = nk(\Omega_{ei} + \Omega_{ea})(T_e - T).$$

En résumé, on peut écrire le système (5.24) sous la forme équivalente suivante :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(n+n_a) + \nabla .((n+n_a)\mathbf{u}) = 0\\ \frac{\partial n_a}{\partial t} + \nabla .(n_a\mathbf{u}) = K_{ion}nn_a - K_{rec}n^3\\ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u}\nabla .\mathbf{u} + \frac{1}{m_i(n+n_a)}\nabla(p+p_e) = \mathbf{0}\\ \frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u}.\nabla p + \gamma p\nabla .\mathbf{u} = S\\ \frac{\partial p_e}{\partial t} + \mathbf{u}_e.\nabla p_e + \gamma p_e\nabla .\mathbf{u}_e = S_e, \end{cases}$$
(5.27)

en rappelant que \mathbf{u}_e est donnée par

$$\mathbf{u}_e = \mathbf{u} - \frac{1}{en} \mathbf{J}_0.$$

Calcul des valeurs propres

Pour étudier l'hyperbolicité du système (5.27), nous nous plaçons dans le cas monodimensionnel plan. Nous introduisons en outre la densité de masse des lourds,

$$\rho = m_i(n+n_a).$$

Le système s'écrit

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{pmatrix} \rho \\ n_a \\ u \\ p \\ p_e \end{pmatrix} + \mathcal{M} \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} \rho \\ n_a \\ u \\ p \\ p_e \end{pmatrix} = \text{second membre}, \qquad (5.28)$$

avec

$$\mathcal{M} = \begin{pmatrix} u & 0 & \rho & 0 & 0 \\ 0 & u & n_a & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u & 1/\rho & 1/\rho \\ 0 & 0 & \gamma p & u & 0 \\ \frac{\gamma p_e J_0}{em_i n^2} & \frac{-\gamma p_e J_0}{en^2} & \gamma p_e & 0 & u_e \end{pmatrix}.$$

En définissant la vitesse du son du fluide global (électrons + ions + neutres) par

$$c = \sqrt{\frac{\gamma(p_e + p)}{\rho}},$$

on calcule les valeurs propres de \mathcal{M} , qui sont

$$\begin{cases} \lambda_1 = u - c \\ \lambda_2 = u_e = u - \frac{J_0}{en} \\ \lambda_3 = \lambda_4 = u \\ \lambda_5 = u + c. \end{cases}$$

La numérotation des valeurs propres ne présage pas de l'ordre de λ_1 et λ_2 . Un point sonique peut apparaître si u = c ou si $u = \frac{J_0}{en}$.

Vecteurs propres et nature des champs caractéristiques

Les vecteurs propres à droite associés aux cinq valeurs propres sont respectivement

.

$$r_1 = \left(1, \frac{n_a}{\rho}, -\frac{c}{\rho}, \frac{\gamma p}{\rho}, \frac{\gamma p_e}{\rho}\right)^t,$$
$$r_2 = \left(1, \frac{n_a}{\rho}, -\frac{J_0}{en\rho}, \frac{\gamma p}{\rho}, \frac{J_0^2}{e^2n^2} - \frac{\gamma p}{\rho}\right)^t,$$

$$r_{3} = \left(1, 1, 0, \frac{m_{i} - 1}{m_{i}n}, \frac{1 - m_{i}}{m_{i}n}\right)^{t},$$

$$r_{4} = \left(1, -1, 0, -\frac{1 + m_{i}}{m_{i}n}, \frac{1 + m_{i}}{m_{i}n}\right)^{t}$$

 et

$$r_5 = \left(1, \frac{n_a}{\rho}, \frac{c}{\rho}, \frac{\gamma p}{\rho}, \frac{\gamma p_e}{\rho}\right)^t.$$

Le sous-espace propre associé à la valeur propre double u est bien de dimension 2.

On peut calculer

$$\begin{cases} \nabla \lambda_1(\mathcal{U}) \cdot r_1(\mathcal{U}) = -\frac{c}{2\rho}(\gamma+1) \neq 0 \ \forall \mathcal{U} \\ \nabla \lambda_2(\mathcal{U}) \cdot r_2(\mathcal{U}) = 0 \ \forall \mathcal{U} \\ \nabla \lambda_3(\mathcal{U}) \cdot r_3(\mathcal{U}) = 0 \ \forall \mathcal{U} \\ \nabla \lambda_4(\mathcal{U}) \cdot r_4(\mathcal{U}) = 0 \ \forall \mathcal{U} \\ \nabla \lambda_5(\mathcal{U}) \cdot r_5(\mathcal{U}) = \frac{c}{2\rho}(\gamma-1) \neq 0 \ \forall \mathcal{U}. \end{cases}$$

Les champs caractéristiques associés aux valeurs propres u et u_e sont donc Linéairement Dégénérés (LD) et correspondent à une discontinuité de contact, tandis que les champs associés à u-c et u+c sont Vraiment Non Linéaires (VNL). Les ondes associées sont donc soit un choc, soit une onde de raréfaction. La première possibilité est à écarter, puisque physiquement on ne s'attend pas à la présence d'ondes de choc. Puisque les champs sont soit LD soit VNL, le système est dit convexe.

 Si

$$\frac{J_0}{en} \neq c,$$

le système (5.28) hors équilibre est hyperbolique (non strictement). Dans le cas contraire, les valeurs propres $\lambda_2 = u_e = u - \frac{J_0}{en}$ et $\lambda_1 = u - c$ sont égales. On a alors $r_1 = r_2$.

Autrement dit, $\lambda_1 = \lambda_2$ est une valeur propre double, tandis que le sous-espace propre correspondant est de dimension 1 : le système n'est plus hyperbolique. On parle alors de *résonnance non linéaire*. Cette perte locale de l'hyperbolicité, liée à la construction du modèle, entraîne un comportement non physique de la solution qui sera évoqué dans le Chapitre 6. Pour plus de détails sur ces résonnances, nous renvoyons le lecteur à [25].

Nous traduisons cette perte locale en disant que le système (5.27), est *faiblement* hyperbolique.

Remarque. Perte de l'hyperbolicité à l'Equilibre Thermodynamique Local.

Supposons qu'on est à l'équilibre thermodynamique local (ETL). Cette hypothèse est faite en considérant que les temps caractéristiques d'ionisation sont petits, et donc que le système relaxe vers un état d'équilibre.

Cela implique tout d'abord que les collisions n'entraînent pas de variation de la densité (équilibre stationnaire), soit

$$\left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{ion} = 0,$$

ou, avec (5.10),

$$K_{ion}nn_a = K_{rec}n^3$$

Cela permet de remplacer la deuxième équation du système (5.27) (conservation de la densité des neutres) par

$$n_a = (K_{eq}(T_e))^{-1} n^2 (5.29)$$

avec

$$K_{eq} = \frac{K_{ion}}{K_{rec}}.$$

Dans le cas de l'ETL, K_{eq} vérifie en outre la *loi de Saha* [14], qui s'écrit (pour un atome d'hydrogène)

$$K_{eq}(T_e) = \left(\frac{2\pi m_e k T_e}{h^2}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{ion}}{k T_e}\right)$$
(5.30)

où h est la constante de Planck, et ε_{ion} l'énergie d'ionisation de l'atome d'hydrogène.

En notant toujours

$$\rho = m_i(n+n_a)$$

la densité de masse des "lourds", la relation (5.29) permet d'écrire

$$\rho = m_i \left(n + \frac{n^2}{K_{eq}(T_e)} \right)$$

ce qui donne

$$n(\rho, T_e) = \frac{K_{eq}(T_e)}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{4\rho}{m_i K_{eq}(T_e)}} - 1 \right).$$

Comme $p_e = nkT_e$, on peut déterminer

$$n(\rho, p_e) = n(\rho, T_e)$$

Le modèle à l'ETL conduit donc à un nouveau système dont la partie homogène s'écrit, en variables (ρ, u, p, p_e)

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) = 0\\ \frac{\partial u}{\partial t} + u\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial x}(p + p_e) = 0\\ \frac{\partial p}{\partial t} + \gamma p\frac{\partial u}{\partial x} + u\frac{\partial p}{\partial x} = 0\\ \frac{\partial p_e}{\partial t} + \gamma p_e\frac{\partial u}{\partial x} + u_e\frac{\partial p_e}{\partial x} - \frac{\gamma p_e J_0}{e}\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{1}{n(\rho, p_e)}\right) = 0. \end{cases}$$

On a

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{n(\rho, p_e)} \right) = -\frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \rho} \Big|_{P_e} \frac{\partial \rho}{\partial x} + \frac{\partial n}{\partial p_e} \Big|_{\rho} \frac{\partial p_e}{\partial x} \right).$$

de sorte que la dernière équation du système devient

$$\frac{\partial p_e}{\partial t} + \frac{\gamma p_e J_0}{en^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \rho} \Big|_{p_e} \right) \frac{\partial \rho}{\partial x} + \gamma p_e \frac{\partial u}{\partial x} + \left(u - \frac{J_0}{en} + \frac{\gamma p_e J_0}{en^2} \left(\frac{\partial n}{\partial p_e} \Big|_{\rho} \right) \right) \frac{\partial p_e}{\partial x} = 0$$

Nous n'entrerons pas dans le détail de la dérivation de n par rapport à ρ et p_e ni du calcul du polynôme caractéristique du système. Disons qu'il est possible de trouver des valeurs de T_e pour lesquelles l'hyperbolicité n'est plus vraie. Il semble toutefois difficile d'obtenir un critère précis d'hyperbolicité. On ne peut la garantir que dans la limite $T_e \longrightarrow 0$ ou $T_e \longrightarrow \infty$.

5.2.3 Ecriture conservative : passage en entropie

Les deux équations de conservation d'énergie (5.19) et (5.20) ne sont pas conservatives. En vue de la résolution numérique, il serait agréable de pouvoir écrire le système (5.27) sous forme conservative, et ainsi utiliser des méthodes classiques. Ceci s'effectue simplement en formulant ces équations d'énergie en terme d'entropies. Ce passage a été suggéré par F. Coquel. Ceci est légitime dans la mesure où les solutions physiques que nous envisageons ne présentent pas de choc.

De manière standard pour un gaz parfait, l'entropie (physique) est de la forme

$$s = s_0 + C_v \log\left(\frac{p}{n^\gamma}\right).$$

Cas des électrons

On remarque que $\frac{p_e}{n^{\gamma}}$, et plus généralement toute fonction concave de $\frac{p_e}{n^{\gamma}}$ est une entropie.

On évalue d'abord

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(n \frac{p_e}{n^{\gamma}} \right) + \nabla \cdot \left(n \mathbf{u}_e \frac{p_e}{n^{\gamma}} \right) :$$

on a

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(n \frac{p_e}{n^{\gamma}} \right) + \nabla \left(n \mathbf{u}_e \frac{p_e}{n^{\gamma}} \right) = \frac{1}{n^{\gamma - 1}} \left(\frac{\partial p_e}{\partial t} + \nabla \left(p_e \mathbf{u}_e \right) \right) + (1 - \gamma) \frac{p_e}{n^{\gamma}} \left(\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{u}_e \cdot \nabla n \right).$$

Mais, utilisant d'une part la cinquième équation de (5.27),

$$\frac{\partial p_e}{\partial t} + \nabla .(p_e \mathbf{u}_e) = \mathcal{S}_e + (1 - \gamma) p_e \nabla .\mathbf{u}_e$$
(5.31)

et d'autre part l'équation de conservation de la densité des électrons,

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{u}_e \cdot \nabla n = \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{ion} - n \nabla \cdot \mathbf{u}_e, \qquad (5.32)$$

on obtient

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(n \frac{p_e}{n^{\gamma}} \right) + \nabla \left(n \mathbf{u}_e \frac{p_e}{n^{\gamma}} \right) = \frac{1}{n^{\gamma - 1}} \mathcal{S}_e + (1 - \gamma) \frac{p_e}{n^{\gamma}} \left(\frac{\partial n}{\partial t} \right)_{ion}$$

qui est une équation conservative.

Plus généralement, on cherche une loi de conservation pour l'entropie $s = \Phi\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right)$, où Φ est une fonction concave. On écrit

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial t} \left(n\Phi\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) \right) + \nabla \cdot \left(n\mathbf{u}_e \Phi\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) \right) &= \\ &= \Phi\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) \left(\frac{\partial n}{\partial t} + \nabla \cdot (n\mathbf{u}_e) \right) + \Phi'\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) \left(n\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) + n\mathbf{u}_e \cdot \nabla\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) \right). \end{split}$$

En utilisant (5.31) et (5.32), on obtient à nouveau l'équation de conservation

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(n\Phi\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) \right) + \nabla \cdot \left(n\mathbf{u}_e \Phi\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) \right) &= \\ &= \left(\Phi\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) - \gamma \frac{p_e}{n^{\gamma}} \Phi'\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) \right) \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{ion} + \frac{1}{n^{\gamma-1}} \Phi'\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) \mathcal{S}_e. \end{aligned}$$

On peut en fait simplifier le second membre de cette loi de conservation pour le choix particulier de la fonction Φ

$$\Phi(a) = a^{\frac{1}{\gamma}},$$

de sorte que

$$\Phi(a) = \gamma a \Phi'(a). \tag{5.33}$$

On obtient alors

$$\frac{\partial}{\partial t}p_e^{\gamma} + \nabla .(\mathbf{u}_e p_e^{\gamma}) = \frac{1}{n^{\gamma-1}} \Phi'\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) \mathcal{S}_e.$$

Puisque

$$\Phi'\left(\frac{p_e}{n^{\gamma}}\right) = \frac{1}{\gamma} n^{\gamma-1} p_e^{\frac{1-\gamma}{\gamma}},$$

on obtient finalement

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(p_e^{\frac{1}{\gamma}} \right) + \nabla \cdot \left(\mathbf{u}_e p_e^{\frac{1}{\gamma}} \right) = \frac{1}{\gamma} \mathcal{S}_e p_e^{\frac{1-\gamma}{\gamma}}.$$

Cas des lourds

La technique est la même : on évalue

$$\begin{split} &\frac{\partial}{\partial t} \left((n+n_a) \frac{p}{(n+n_a)^{\gamma}} \right) + \nabla . \left((n+n_a) \mathbf{u} \frac{p}{(n+n_a)^{\gamma}} \right) = \\ &= \frac{1}{(n+n_a)^{\gamma-1}} \left(\frac{\partial p}{\partial t} + \mathbf{u} . \nabla p + p \nabla . \mathbf{u} \right) - (\gamma - 1) \frac{p}{(n+n_a)^{\gamma}} \left(\frac{\partial}{\partial t} \left(n+n_a \right) + \mathbf{u} . \nabla \left(n+n_a \right) \right) \\ &= \frac{1}{(n+n_a)^{\gamma-1}} \left(\mathcal{S} - (\gamma - 1) p \nabla . \mathbf{u} \right) + (\gamma - 1) \frac{p}{(n+n_a)^{\gamma}} \left(n+n_a \right) \nabla . \mathbf{u}, \end{split}$$

 soit

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{p}{(n+n_a)^{\gamma}} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{p}{(n+n_a)^{\gamma}} \mathbf{u} \right) = \frac{\mathcal{S}}{(n+n_a)^{\gamma-1}}.$$

De la même façon que précédemment, on trouve

$$\begin{split} \frac{\partial}{\partial t} \left((n+n_a) \Phi\left(\frac{p}{(n+n_a)^{\gamma}}\right) \right) + \nabla \cdot \left((n+n_a) \mathbf{u} \Phi\left(\frac{p}{(n+n_a)^{\gamma}}\right) \right) &= \\ &= \frac{1}{(n+n_a)^{\gamma-1}} \Phi'\left(\frac{p}{(n+n_a)^{\gamma}}\right) \mathcal{S}. \end{split}$$

En particulier, si Φ est de la forme (5.33), on obtient

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(p^{\frac{1}{\gamma}}\right) + \nabla \cdot \left(\mathbf{u}p^{\frac{1}{\gamma}}\right) = \frac{1}{\gamma}\mathcal{S}p^{\frac{1-\gamma}{\gamma}}.$$

Bilan

Le système (5.27) s'écrit donc sous la forme conservative

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(n+n_{a}) + \nabla .((n+n_{a})\mathbf{u}) = 0\\ \frac{\partial n_{a}}{\partial t} + \nabla .(n_{a}\mathbf{u}) = K_{ion}nn_{a} - K_{rec}n^{3}\\ \frac{\partial}{\partial t}((n_{a}+n)\mathbf{u}) + \nabla .\left((n_{a}+n)\mathbf{u}\otimes\mathbf{u} + \frac{1}{m_{i}}(p_{e}+p)\right) = \mathbf{0}\\ \frac{\partial}{\partial t}((n+n_{a})s) + \nabla .((n+n_{a})s\mathbf{u}) = \frac{1}{\gamma}\mathcal{S}p^{\frac{1-\gamma}{\gamma}}\\ \frac{\partial}{\partial t}(ns_{e}) + \nabla .(ns_{e}\mathbf{u}_{e}) = \frac{1}{\gamma}\mathcal{S}_{e}p^{\frac{1-\gamma}{\gamma}}, \end{cases}$$
(5.34)

avec les variables $(n + n_a, n_a, (n + n_a)\mathbf{u}, (n + n_a)s, ns_e)$, les entropies étant définies par

$$s = \frac{p^{\frac{1}{\gamma}}}{n + n_a}$$

 et

$$s_e = \frac{p_e^{\gamma}}{n}.$$

Rappelons que

$$\mathcal{S} = nk(\Omega_{ei} + \Omega_{ea})(T_e - T).$$

 et

$$\mathcal{S}_e = (\gamma - 1) \left(\frac{m_e}{e^2} \frac{\nu_{ei} + \nu_{ea}}{n} |\mathbf{J}_0|^2 + \varepsilon_{ion} \left(K_{rec} n^3 + K_{ion} n n_a \right) \right) - nk(\Omega_{ei} + \Omega_{ea})(T_e - T),$$

A l'instar du système (5.27) écrit sous forme non conservative, le système (5.34) est "convexe" et faiblement hyperbolique (le système est résonnant si $J_0 = cen$). L'avantage de cette formulation conservative est double : d'une part elle permet l'application de méthodes classiques, et d'autre part elle rend le système plus robuste [30].

5.3 Etablissement d'un modèle totalement ionisé

La résolution numérique du modèle général présente de nombreuses difficultés numériques. On s'attend notamment à ce que l'ionisation se fasse dans une couche limite, ce qui nécessite des traitements numériques adéquats [30]. Nous proposons dans cette section un modèle plus simple, limité à un plasma totalement ionisé. Il est néanmoins physiquement représentatif, et conduit à un système possédant les mêmes propriétés d'hyperbolicité que dans le cas général. Les méthodes mises en oeuvre en vue de sa résolution numérique (Chapitre 6) pourront donc être appliquées pour la recherche de la solution dans le cas général.

5.3.1 Elaboration du modèle simplifié

Nous repartons du système (5.24), écrit sous forme non conservative :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(n+n_{a}) + \nabla .((n+n_{a})\mathbf{u}) = 0\\ \frac{\partial n_{a}}{\partial t} + \nabla .(n_{a}\mathbf{u}) = K_{ion}nn_{a} - K_{rec}n^{3}\\ m_{i}\{\frac{\partial}{\partial t}((n_{a}+n)\mathbf{u}) + \nabla .((n_{a}+n)\mathbf{u}\otimes\mathbf{u})\} + \nabla (p_{e}+p) = \mathbf{0}\\ \frac{\partial W}{\partial t} + \nabla .((W+p)\mathbf{u}) + \mathbf{u}.\nabla p_{e} = n(\Omega_{ei}+\Omega_{ea})k(T_{e}-T)\\ \frac{\partial W_{e}}{\partial t} + \nabla .\left((W_{e}+p_{e})(\mathbf{u}-\frac{\mathbf{J}_{0}}{en})\right) - (\mathbf{u}-\frac{\mathbf{J}_{0}}{en}).\nabla p_{e} = \frac{m_{e}}{e^{2}}\frac{\nu_{ei}+\nu_{ea}}{n}|\mathbf{J}_{0}|^{2} - n(\Omega_{ei}+\Omega_{ea})k(T_{e}-T) \end{cases}$$
(5.35)

avec

$$\begin{cases} p_e = nkT_e, \quad p = (n+n_a)kT\\ W = (n+n_a)\left(\frac{kT}{\gamma-1} + \frac{1}{2}m_a \left|\mathbf{u}\right|^2\right)\\ W_e = n_e\left(\frac{kT_e}{\gamma-1} + \varepsilon_{ion}\right) \end{cases}$$
(5.36)

Le plasma est supposé entièrement ionisé, de sorte que $n_a = 0$. Avec cette hypothèse, nous limitons le champ d'application de ce modèle à la zone de chauffage et à la zone d'expansion. Ce modèle devra être complété par de nouvelles conditions limites à gauche qui seront données dans la Section 5.3.3.

La deuxième équation de (5.35) disparaît donc, et la première devient

$$\frac{\partial}{\partial t}n + \nabla .(n\mathbf{u}) = 0.$$

En outre, on a $\nu_{ea} = \Omega_{ea} = 0$ d'une part, et $\varepsilon_{ion} = 0$ d'autre part.

Les hypothèses (i-v) de la Section (5.2.1) demeurent valables. On suppose maintenant que les ions sont froids, de sorte que

$$T + T_e \simeq T_e.$$

Cela permet de se ramener à un modèle à une température. Cette hypothèse (vi), justifiée par la Remarque 2, (page 159), et la quasi-neutralité du plasma (i) conduisent à

$$p_e + p \simeq p_e.$$

La troisième équation de (5.35) s'écrit donc

$$m_i \{ \frac{\partial}{\partial t} (n\mathbf{u}) + \nabla . (n\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}) \} + \nabla p_e = \mathbf{0}.$$

En sommant les deux équations de conservation de l'énergie, on obtient

$$\frac{\partial (W_e + W)}{\partial t} + \nabla \cdot \left((W_e + W + p_e) \mathbf{u} - (W_e + p_e) \frac{\mathbf{J}_0}{en} \right) + \frac{\mathbf{J}_0}{en} \cdot \nabla p_e = \frac{m_e}{e^2} \frac{\nu_{ei}}{n} \left| \mathbf{J}_0 \right|^2.$$
(5.37)

Pour un plasma totalement ionisé et froid, les équations d'états (5.36) donnent

$$W_e + W = \frac{\rho |\mathbf{u}|^2}{2} + \frac{p_e}{\gamma - 1}$$

 et

$$W_e + p_e = \frac{\gamma}{\gamma - 1} p_e,$$

de sorte que (5.37) s'écrit, en notant $\tilde{W} = W_e + W$,

$$\frac{\partial \tilde{W}}{\partial t} + \nabla \cdot \left((\tilde{W} + p_e) \mathbf{u} - \frac{\gamma}{\gamma - 1} p_e \frac{\mathbf{J}_0}{en} \right) + \frac{\mathbf{J}_0}{en} \cdot \nabla p_e = \frac{m_e}{e^2} \frac{\nu_{ei}}{n} \left| \mathbf{J}_0 \right|^2$$

En introduisant

$$\alpha = \frac{m_i}{e} \mathbf{J}_0, \tag{5.38}$$

cette équation devient

$$\frac{\partial \tilde{W}}{\partial t} + \nabla \cdot \left((\tilde{W} + p_e) \mathbf{u} \right) - \frac{\gamma}{\gamma - 1} \left(\frac{p_e}{\rho} \nabla \cdot \alpha + \alpha \cdot \nabla \frac{p_e}{\rho} \right) + \frac{\alpha}{\rho} \cdot \nabla p_e = \frac{m_e}{m_i} \frac{\nu_{ei}}{\rho} |\alpha|^2 \,.$$

En résumé, le système de lois de conservation pour un plasma totalement ionisé est

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla. \left(\rho \mathbf{u}\right) = 0, \tag{5.39a}$$

$$\frac{\partial \left(\rho \mathbf{u}\right)}{\partial t} + \nabla \left(\rho \mathbf{u} \otimes \mathbf{u}\right) + \nabla p_e = \mathbf{0}, \tag{5.39b}$$

$$\frac{\partial \tilde{W}}{\partial t} + \nabla \cdot \left((\tilde{W} + p_e) \mathbf{u} \right) - \frac{\gamma}{\gamma - 1} \alpha \cdot \nabla (\frac{p_e}{\rho}) + \frac{1}{\rho} \alpha \cdot \nabla p_e = \frac{m_e \nu_{ei} \left| \alpha \right|^2}{m_i} \frac{1}{\rho} + \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{p_e}{\rho} \nabla \cdot \alpha, \tag{5.39c}$$

avec les relations de fermeture

$$\left\{ \begin{array}{l} \tilde{W} = \frac{p_e}{\gamma - 1} + \frac{\rho \left| \mathbf{u} \right|^2}{2} \\ p_e = \frac{\rho k T_e}{m_i} \end{array} \right.$$

Remarque 1. Comparaison avec le modèle global.

 \cdot La quasi-neutralité (ii) et la condition sur le courant (iii) conduisent toujours à

$$div \, \mathbf{J}_0 = 0$$

· L'hypothèse (iii) et l'équation (5.38) permettent d'exprimer la vitesse électronique sous la forme

$$\mathbf{u}_e = \mathbf{u} - \frac{1}{\rho}\alpha.$$

· Le champ électrique, toujours calculé à partir de l'équation de conservation de la quantité de mouvement des électrons, s'écrit ici

$$\mathbf{E} = \frac{1}{en} (\mathbf{C}_{ei} - \nabla p_e)$$

avec

$$\mathbf{C}_{ei} = -m_e n \nu_{ei} (\mathbf{u}_e - \mathbf{u}) = \frac{m_e \nu_{ei}}{e} \mathbf{J}_0.$$

Il s'ensuit que

$$\mathbf{E} = \frac{m_e \nu_{ei}}{e\rho} \alpha - \frac{|\alpha|}{|\mathbf{J}_0|} \frac{1}{\rho} \nabla p_e$$

Remarque 2. Justification de l'hypothèses (vi) des ions froids.

Décrivons le processus de chauffage du plasma : ce sont essentiellement les électrons qui reçoivent l'énergie apportée par le courant extérieur, et donc T_e augmente. Quand la densité est élevée, les processus collisionnels sont importants et il y a transfert de l'énergie acquise par les électrons vers les lourds. Lors de la détente du plasma, la densité décroît, ce qui signifie qu'il y a moins d'échange d'énergie entre les électrons et les lourds. Ainsi quand on parcourt la zone d'ionisation en s'éloignant de l'anode, les électrons sont toujours autant chauffés, mais transfèrent de moins en moins d'énergie aux lourds, c'està-dire que $T_e - T_i$ augmente. Il est donc raisonnable de supposer que dans les zones de chauffage et d'expansion la température ionique est faible devant la température électronique.

Remarque 3. Si $|\alpha| = 0$, Le système (5.39a -5.39c) est tout simplement le système de la dynamique des gaz.

5.3.2 Propriétés mathématiques du système

Ecriture conservative en énergie

Dans le cas monodimensionnel, l'équation (5.39b) permet d'écrire

$$-\frac{\alpha}{\rho}\frac{\partial p_e}{\partial x} = \alpha\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\alpha}{2}\frac{\partial u^2}{\partial x} = \alpha\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial\left(\alpha u^2\right)}{\partial x} - \frac{u^2}{2}\frac{\partial\alpha}{\partial x}$$

En injectant ce résultat dans l'équation sur l'énergie (5.39c) et en rappelant que le courant extérieur (et donc α) est constant au cours du temps, on peut réécrire le système (5.39a)-(5.39c) sous forme conservative, avec l'inconnue $\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \tilde{W} - \alpha u)^t$:

$$\begin{cases}
\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} = 0 \\
\frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial p_e}{\partial x} = 0 \\
\frac{\partial (\tilde{W} - \alpha u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left((\tilde{W} + p_e - \frac{\alpha u}{2})u - \frac{\gamma \alpha}{\gamma - 1} \frac{p_e}{\rho} \right) = \frac{m_e \nu_{ei} \alpha^2}{m_i} \frac{1}{\rho} - \frac{u^2}{2} \frac{\partial \alpha}{\partial x}.
\end{cases}$$
(5.40)

Hyperbolicité du système

Pour étudier l'hyperbolicité de ce système, la variable non conservative $\mathcal{U} = (\rho, u, p_e)$ permet de simplifier les calculs. La troisième équation s'écrit alors

$$\frac{\partial p_e}{\partial t} + (u - \frac{\alpha}{\rho})\frac{\partial p_e}{\partial x} + \gamma \alpha \frac{p_e}{\rho^2}\frac{\partial \rho}{\partial x} + \gamma p_e\frac{\partial u}{\partial x} = (\gamma - 1)\frac{m_e\nu_{ei}\alpha^2}{m_i}\frac{1}{\rho} + \gamma \frac{p_e}{\rho}\frac{\partial \alpha}{\partial x}.$$
 (5.41)

Les propriétés d'hyperbolicité du système (5.40) sont équivalentes à celles du système homogène

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \mathcal{M}\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} = 0,$$

avec

$$\mathcal{M} = \begin{bmatrix} u & \rho & 0\\ 0 & u & \frac{1}{\rho}\\ \frac{\gamma \alpha p_e}{\rho^2} & \gamma p_e & u - \frac{\alpha}{\rho} \end{bmatrix}$$

Les valeurs propres de cette matrice sont

$$\begin{cases} \lambda_1 = u - c\\ \lambda_2 = u - \frac{\alpha}{\rho} = u_e\\ \lambda_3 = u + c, \end{cases}$$

avec

$$c=\sqrt{\frac{\gamma p_e}{\rho}}$$

la vitesse du son du fluide. Notons que la valeur propre λ_2 , est la vitesse électronique dans la zone de chauffage, et la vitesse ionique dans la zone d'expansion.

Ce système à les mêmes propriétés que le système (5.27) issu du modèle global : les champs caractéristiques associés à λ_1 et λ_3 sont VNL, tandis que celui associé à λ_2 est LD. Le système est "convexe" et faiblement hyperbolique. Il devient résonnant si $\lambda_1 = \lambda_2$, et des points soniques apparaissent si u = c ou si $u = \alpha/\rho$. De plus, le système est strictement hyperbolique dans la zone d'expansion ($\alpha = 0$).

Ecriture conservative en entropie

Même si le système en énergie est ici conservatif, il est possible, comme pour le modèle global, de proposer une autre écriture de l'équation de conservation de l'énergie (5.41), en utilisant les variables (ρ , ρu , ρs). L'entropie s est définie comme dans la Section 5.2.3 par

$$s = \frac{p_e^{1/\gamma}}{\rho}.$$

On calcule

$$\frac{\partial(\rho s)}{\partial t} + \frac{\partial(u\rho s)}{\partial x} = \frac{1}{\gamma} p_e^{1/\gamma - 1} \left(\frac{\partial p_e}{\partial t} + u \frac{\partial p_e}{\partial x} \right) + p_e^{1/\gamma} \frac{\partial u}{\partial x}$$
$$= \alpha \frac{\partial s}{\partial x} + \frac{1}{\gamma} p_e^{1/\gamma - 1} S_1 + s \frac{\partial \alpha}{\partial x},$$

en remplaçant $\left(\frac{\partial p_e}{\partial t} + u \frac{\partial p_e}{\partial x}\right)$ par sa valeur tirée de (5.41) et en notant

$$S_1 = (\gamma - 1) \frac{m_e \nu_{ei} \alpha^2}{m_i} \frac{1}{\rho}.$$

Le système (5.40) est donc équivalent au système, également conservatif,

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} = 0\\ \frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial p_e}{\partial x} = 0\\ \frac{\partial (\rho s)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left((\rho u - \alpha) s \right) = \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{m_e \nu_{ei} \alpha^2}{m_i} \frac{p_e^{1/\gamma - 1}}{\rho}. \end{cases}$$
(5.42)

Ce système demeure convexe et faiblement hyperbolique. La différence par rapport au système "en énergie" (5.40), réside dans le fait que le courant extérieur, α , n'apparaît plus que dans le flux de la troisième équation, et non dans la variable. Cet argument sera utilisé dans la Section 6.7.

5.3.3 Détermination des conditions limites à gauche

Ne pas modéliser explicitement la zone d'ionisation revient à supposer que l'ionisation se fait sur une couche limite. Il faut donc se donner des conditions aux limites sur la frontière amont du domaine en supposant que l'ionisation y est totale. Nous devons dans cette section déterminer les valeurs limites de la vitesse, de la densité et de la température. On suppose que les ions sont soniques sur la frontière, de sorte que leur vitesse est donnée en fonction de la température électronique par

$$u = \sqrt{\frac{kT_e}{m_i}}.$$

On connaît par ailleurs le flux de molécules d'hydrogène arrachées de l'anode. Il est donné par d'autres travaux sur la source d'ions, conduit parallèlement à notre étude. On en déduit le flux d'atomes, noté φ , puis de la valeur de la densité limite.

$$n = \frac{\varphi}{u}.$$

Il reste maintenant à estimer la température T_e sur la frontière. Nous allons procéder de manière heuristique, en considérant que l'équilibre thermodynamique local (ETL) est atteint. On a donc

$$\frac{n^2}{n_a} = K_{eq}(T_e) \tag{5.43}$$

où K_{eq} est donné par la loi de Saha (5.30), et représenté sur la Figure 5.3.



FIGURE 5.3 – Evaluation de la température limite.

La croissance rapide de K_{eq} en fonction de T_e correspond à une ionisation rapide de l'hydrogène. On considère que l'ionisation est totale quand K_{eq} se stabilise, soit d'après la courbe quand $T_e \simeq 20\,000$ K. On prend cette valeur comme température limite. On calcule alors la vitesse (de l'ordre de $10^4 m s^{-1}$) et la densité des particules ($\simeq 10^{23} m^{-3}$). Les conditions limites sont constantes puisqu'on est à l'équilibre. Dans la suite on notera u_g, n_g, T_g la valeur des variables sur la frontière.

Remarque. On peut vérifier a posteriori que notre estimation de la température est correcte : on définit la densité des "lourds" par

$$N_0 = n_a + n_i = \frac{\rho}{m_i}$$

puis on pose

$$r = \frac{n}{N_0},$$

 et

$$a = \frac{1}{N_0} K_{eq}(T_e).$$

La relation (5.43) s'écrit alors

$$\frac{n^2}{N_0 - n} = N_0 a,$$

ou

$$r^2 + ar - a = 0$$

Puisque r doit être positif et que a > 0, la solution admissible de ce polynôme est

$$r = \frac{-a + \sqrt{a^2 + 4a}}{2}.$$
 (5.44)

Supposer que l'ionisation est complète revient à écrire que $N_0 \simeq n$, de sorte que

$$r = 1 - \mathrm{o}(N_0 - n)$$

et donc l'équation (5.44) est équivalente à

$$o(N_0 - n)a = 1 - o(N_0 - n),$$

ce qui implique formellement que

 $a \gg 1$

et donc que

$$K_{eq}(T_e) \gg N_0.$$

On considère donc que l'ionisation est totale si K_{eq} est supérieur d'un ordre de grandeur à N_0 , alors égale à n. Puisque $n \simeq 10^{23} m^{-3}$, il faut que $K_{eq}(T_e) \simeq 10^{24} m^{-3}$, soit $T_e \simeq 18\,000$ K d'après la formule (5.30).

5.4 Conclusion

Nous avons exposé un modèle hydrodynamique apte à rendre compte de la création d'un plasma à partir d'un gaz neutre et de son chauffage par un courant d'électrons extérieur. Un certain nombre d'hypothèses, dont la quasi-neutralité du plasma permettent de négliger l'équation de champ et de se ramener à un système de lois de conservation (trois espèces, deux températures). Son hyperbolicité n'est pas garantie, en particulier si on fait l'hypothèse de l'ETL. Hors ETL, le système est faiblement hyperbolique : des résonnances non linéaires (croisements de valeurs propres de natures différentes) peuvent se produire et entraîner une perte locale d'hyperbolicité. En l'absence de choc, une formulation en entropie conduit à l'écriture sous forme conservative du système.

Le modèle a ensuite été réduit à un plasma entièrement ionisé (deux espèces, une température). Etant donné qu'il n'est valable que sur les zones de chauffage et d'expansion, il a fallu préciser les conditions limites à l'interface entre la zone d'ionisation et la zone de chauffage. Le système qui résulte de ce modèle présente les mêmes propriétés que le système hors ETL précédemment évoqué. Sa résolution numérique est traitée dans le chapitre suivant.

Chapitre 6

Résolution numérique en 1D du modèle totalement ionisé

6.1 Introduction

Nous nous intéressons dans ce chapitre aux différentes méthodes numériques employées lors de la résolution monodimensionnelle du système issu du modèle totalement ionisé présenté dans la Section 5.3. Nous commençons par décrire le problème dans la Section 6.2. La première difficulté consiste à proposer une modélisation acceptable du courant extérieur (Section 6.3). Lors d'études préliminaires qui ne seront pas détaillées ici [36], l'utilisation de la méthode des caractéristiques a permis de mettre en évidence certaines difficultés inhérentes au modèle. Notamment, nous avons constaté que la présence d'un terme de chauffage et du terme source dans l'équation de conservation de l'énergie (5.40) se traduit par de forts gradients de température entre la zone d'ionisation (où sont données les conditions limites) et la zone de chauffage. L'utilisation de la méthode des caractéristiques entraîne très rapidement (deux ou trois itérations) des densités négatives. Ce constat nous a incité à nous orienter vers un schéma conservant la positivité de la densité et de l'énergie, le schéma HLLE (Section 6.6). Avant de nous intéresser à la résolution complète du système, nous présentons des traitements spécifiques liés à la couche limite qui se forme en amont de la zone de chauffage (Section 6.4) et à la détente dans le vide qui se produit dans la zone d'expansion (Section 6.5). En dehors de ces spécificités, le schéma HLLE est utilisé de manière standard. Cette procédure donne des solutions non physiques, à cause de la perte d'hyperbolicité due à l'existence de points résonnants. Nous proposons alors une autre méthode de résolution, fondée sur un couplage de schémas à l'interface entre la zone de chauffage et la zone d'expansion, qui permet de supprimer les résonnances (Section 6.7).

Pour simplifier l'écriture, nous noterons dans cette section p et T la pression et la température électroniques, au lieu de p_e et T_e , et W l'énergie totale, plutôt que \tilde{W} .

6.2 Description du problème

6.2.1 Description du problème et notations

Nous cherchons U solution sur $\Omega \times \mathbb{R}^+$ du système

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = \mathcal{T},\tag{6.1}$$

où $\Omega \subset \mathbb{R}^+$ désigne l'ensemble formé de la zone de chauffage (Ω_c) et de la zone d'expansion (Ω_e) . Nous utilisons la formulation en entropie du système, de sorte que

$$\mathbf{U} = \left(\begin{array}{c} \rho\\ \rho u\\ \rho s\end{array}\right)$$

 et

$$\mathbf{F}(\mathbf{U}) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ (\rho u - \alpha) s \end{pmatrix}.$$

Le terme source \mathcal{T} est défini par

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{m_e \nu_{ei} \alpha^2}{m_i} \frac{p^{1/\gamma - 1}}{\rho} \end{pmatrix},$$

avec

$$\nu_{ei} = \frac{\rho}{m_i} a_{ei}(T,\rho) T^{\frac{-1}{\gamma-1}},$$

où a_{ei} est défini dans l'Annexe A. Le système (6.1) est faiblement hyperbolique, et il peut devenir résonnant dans la zone de chauffage.

Il doit être complété par une condition initiale et des conditions aux limites. La condition initiale, $\mathbf{U}_0(x) = \mathbf{U}(x,0)$, doit permettre de décrire la détente du plasma dans le vide, soit

$$\mathbf{U}_0(x) = \mathbf{0} \text{ sur } \Omega_e.$$

La détente dans le vide n'ayant été traitée que pour $\alpha = 0$, nous nous donnons une condition initiale ad-hoc dans la zone de chauffage, vérifiant $\mathbf{U}_0(0) = \mathbf{U}_g$: sur Ω_c , $\rho_0(x)$ est décroissante linéairement, $u_0(x)$ est croissante avec la pente opposée et $T_0(x) = T_g$ (cf. Figure 6.1).

Les conditions limites sont forcément artificielles dans la mesure où le domaine d'étude a été restreint.

• A gauche, nous posons

$$\mathbf{U}(0,t) = \mathbf{U}_a,$$

les composantes de U_g ayant été définies dans la Section 5.3.3. • Tant que le plasma ne s'est pas propagé dans tout Ω_e , il n'est pas nécessaire de préciser une condition limite

à droite, puisque le domaine y est vide. Il faut savoir que, dans la source que nous étudions, la zone d'expansion est très grande devant la zone de chauffage (d'un rapport 2 000). Dans les cas tests que nous envisageons dans ce chapitre, nous nous contentons de prendre Ω_e 20 fois plus grand que Ω_c : c'est suffisant pour que le plasma n'ait pas encore atteint le bord du domaine à l'instant où les résultats sont présentés. Pour les simulations de validation que nous avons effectuées, nous avons toutefois dû imposer une condition limite à droite. Elle est artificielle, puisque physiquement la frontière droite représente l'endroit où les particules chargées commencent à ressentir l'effet du champ électrique extérieur (voir *décomposition du domaine*, Introduction générale, Section 0.2.2). Nous avons choisi des conditions limites absorbantes. Elles sont décrites dans l'Annexe B.



FIGURE 6.1 – Définitions des conditions initiales.

Nous discrétisons le système (6.1) par une méthode de différences finies. Le domaine Ω est maillé régulièrement avec K nœuds (Fig. 6.2), auxquels on ajoute deux noeuds fictifs pour la prise en compte des conditions aux limites, j = 0 et j = K + 1. On note \mathbf{U}_j^n la valeur de \mathbf{U} au temps $n\Delta t$ au point $j\Delta x$, c'est à dire sur la maille $[(j - \frac{1}{2})\Delta x, (j + \frac{1}{2})\Delta x]$, notée M_j . La zone de chauffage contient les nœuds numérotés de 1 à l; la zone d'expansion contient les nœuds numérotés de l + 1 à K + 1. L'interface entre ces deux zones est donc située entre les mailles M_l et M_{l+1} , en

$$x_l = \left(l + \frac{1}{2}\right)\Delta x.$$

Le pas d'espace Δx étant choisi, le pas de temps est calculé à partir d'une condition CFL qui dépend du schéma utilisé. Les schémas considérés peuvent s'écrire sous forme conservative, c'est-à-dire que, pour tout $j \in [0, K + 1]$,

$$\mathbf{U}_{j}^{n+1} = \mathbf{U}_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{g}(\mathbf{U}_{j}^{n}, \mathbf{U}_{j+1}^{n}) - \mathbf{g}(\mathbf{U}_{j-1}^{n}, \mathbf{U}_{j}^{n})]$$

où $\mathbf{g}(\mathbf{U}_{j}^{n}, \mathbf{U}_{j+1}^{n})$ désigne le flux numérique du schéma, calculé à l'interface entre les mailles M_{j} et M_{j+1} .

La valeur importante du terme source peut nécessiter un traitement particulier sur la première maille. Cela fait l'objet de la Section 6.4. Avant tout, nous précisons la valeur de α , ce qui revient à définir J_0 .



FIGURE 6.2 – Résolution numérique : notations.

6.3 Définition du courant extérieur

Lors de l'établissement des modèles, que ce soit le modèle global ou le modèle totalement ionisé, nous avons fait les hypothèses

$$\left\{ \begin{array}{l} n_i = n_e \\ \mathbf{J} \simeq \mathbf{J}_0 \end{array} \right.$$

qui impliquent

 $\nabla . \mathbf{J}_0 = 0.$

Dans le cas monodimensionnel plan, cette relation devient

$$\frac{dJ_0}{dx} = 0 \tag{6.2}$$

c'est-à-dire que J_0 est une constante. Or il est clair que le chauffage ne se fait que sur une partie du plasma, ce qui a conduit à définir la zone d'expansion par $\mathbf{J}_0 = 0$. Dans le cas monodimensionnel, il y a une incompatibilité entre cette définition et la condition (6.2). Cette difficulté illustre l'incohérence de fond qu'il y a à vouloir résoudre un problème clairement multi-dimensionnel (au moins 2D) en se restreignant à la résolution d'un système monodimensionnel. Cependant, dans l'étude de problèmes aussi complexes, cette étape est nécessaire. Il faut donc se donner une définition du courant extérieur qui soit la plus raisonnable possible. Nous avons envisagé deux possibilités.

La première est de définir le courant extérieur par une fonction de Heaviside centrée en x_l :

$$J_0(x) = J_0^0 Y(x - x_l) \tag{6.3}$$

où J_0^0 est la valeur donnée du courant à l'interface entre les zones d'ionisation et de chauffage. Le courant est défini comme une constante par morceaux, nulle dans la zone d'expansion. Sa dérivée est nulle presque partout, mais sa dérivée en x_l est une masse de Dirac, ce qui introduit une difficulté dans la mesure où le calcul de cette dérivée intervient au cours de la résolution (voir par exemple l'équation (5.40)).

Pour éviter cet inconvénient, une méthode qui paraît naturelle consiste à lisser le courant à l'interface entre les zones de chauffage et d'expansion, de façon à ce qu'il soit C^1 partout, tout en restant nul dans la zone d'expansion. Nous définissons donc J_0 par

$$J_0(x) = \begin{cases} J_0^0 & \text{sur } [0, x_l - \varepsilon] \\ f_{\varepsilon}(x) & \text{sur } [x_l - \varepsilon, x_l] \\ 0 & \text{pour } x \ge x_l \end{cases}$$
(6.4)

où ε représente la longueur sur laquelle le courant est lissé ($\varepsilon \leq x_l$). C'est un paramètre qui permet de régler la pente du courant lors de la transition entre les zones de chauffage et d'expansion. Il reste à définir une fonction f_{ε} ayant la régularité désirée. Nous pouvons par exemple prendre un polynôme du troisième degré. Les coefficients de ce polynôme sont déterminés de manière unique, ce qui donne

$$f_{\varepsilon}(x) = \frac{J_0^0}{\varepsilon^3} \left(2(x - x_l)^3 + 3\varepsilon(x - x_l)^2 \right).$$

On vérifie bien que

$$\begin{cases} f_{\varepsilon}(x_{l} - \varepsilon) = J_{0}^{0} \\ f_{\varepsilon}(x_{l}) = 0 \\ f_{\varepsilon}'(x_{l} - \varepsilon) = f_{\varepsilon}'(x_{l}) = 0 \end{cases}$$

Nous verrons plus loin (Sections 6.6.2 et 6.7.3) que cette définition, bien que naturelle, conduit à l'apparition de résonnances dans le système et à des solutions non physiques.



FIGURE 6.3 – Définition du courant extérieur (normalisé) sur [0,1], avec saut (noir) ou lissé : $\varepsilon = 0.1$ (vert), $\varepsilon = 0.05$ (rouge). $x_l = 0.5$.

Nous représentons sur la Figure 6.3 différents types de courant, définis par (6.3) ou par (6.4). Dans tous les cas, on a

$$J_0 = \alpha = 0$$

dans la zone d'expansion et donc le système (6.1) y est équivalent au système de la dynamique des gaz.

6.4 Traitement de la couche limite

Nous avons dû envisagé ce traitement particulier du fait de la présence du terme source qui s'avère "grand" dans l'équation de conservation de l'énergie (ou de l'entropie). Cela se traduit par un fort gradient de température entre la frontière (nœud k = 0) où elle est fixée constante et le nœud k = 1. Comme nous ne devons faire face à ce problème que sur la troisième équation du système (6.1), nous décrivons la technique retenue sur l'équation de conservation scalaire

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial f(u(x,t))}{\partial x} = T(u)$$

où T est un terme source "grand", avec la condition limite

$$u(0,t) = C$$
, constante.

La méthode employée consiste à raffiner localement le maillage en temps et en espace.

Soit κ un entier. On fait le changement de variable

$$\begin{cases} y = \kappa x\\ s = \kappa t \end{cases}$$

L'équation devient

$$\frac{\partial}{\partial s}\left(u(\frac{y}{\kappa},\frac{s}{\kappa})\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left[f(u(\frac{y}{\kappa},\frac{s}{\kappa}))\right] = \frac{1}{\kappa}T(u).$$

On pose

$$w(y,s) = u(\frac{y}{\kappa}, \frac{s}{\kappa})$$

et on raffine la première maille en la divisant en κ mailles réduites : connaissant $u_0^n=C$ et u_1^n on approche w par

$$w_i^0 = u_0^n + i \frac{u_1^n - u_0^n}{\kappa}, \text{ pour } i \in [0, \kappa]$$

 et

$$w_{\kappa+1}^0 = u_1^n + \frac{u_2^n - u_1^n}{\kappa}.$$

On doit résoudre pour $i \in [1,\kappa]$ et $m \in [0,\kappa-1]$

$$w_i^{m+1} = w_i^m - \frac{\Delta t}{\kappa} (g_{i+\frac{1}{2}}^m - g_{i-\frac{1}{2}}^m) + \frac{\Delta t}{\kappa} \frac{T(w_i)}{\kappa}$$

où $g_{i+1/2}^m$ désigne la valeur du flux numérique en $(i + \frac{1}{2})\frac{\Delta x}{\kappa}$. On utilise le même flux numérique pour la résolution sur le maillage fin que sur le maillage initial.

La valeur de w_0 reste inchangé, puisque $w_0 = u_0 = C$ est la condition limite imposée. Il ne reste qu'à prendre

$$u_1^{n+1} = w_{\kappa}^{\kappa}.$$

Ce raffinement de maillage revient en fait à considérer un terme source plus réduit à chaque "sous-itération" en temps.

Il n'est pas toujours nécessaire d'appliquer cette technique. Dans le cas où le raffinement n'est pas indispensable, nous vérifions que sa mise en oeuvre ne modifie pas les résultats (voir Figure 6.10, page 183).

6.5 Traitement de l'expansion dans le vide

Nous ne traitons ce problème que pour un courant extérieur nul, c'est-à-dire $\alpha(x) = 0$, et on cherche $\mathcal{U} = (\rho, u, p)^t$ solution du système d'Euler

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + A(\mathcal{U})\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} = \mathbf{0}.$$
(6.5)

On veut calculer le flux numérique à l'interface matière / vide.

Une technique habituelle consiste à approcher le vide par un gaz de densité très faible et à calculer le flux numérique de la même façon que ce qui est fait entre deux mailles non vides. Or l'étude que nous menons présente par ailleurs un certain nombre de difficultés numériques : pour limiter les erreurs d'interprétation qui pourraient être dues à cette approximation, une méthode plus rigoureuse a été préférée : elle consiste à utiliser le flux numérique du schéma de *Godunov*. Ce schéma est basé sur une résolution exacte d'un problème de Riemann.

Connaissant \mathcal{U}_g^n la valeur de l'inconnue au temps n sur la dernière maille non vide, on peut calculer la valeur moyenne $\mathcal{U}_I = (\rho_I, u_I, p_I)^t$ à l'interface entre une "maille pleine" et une "maille vide". Nous allons montrer le résultat suivant :

Proposition 15

Dans le cas d'une détente, la valeur \mathcal{U}_I de l'inconnue à l'interface est donnée par

$$\begin{cases} \rho_I = \left[\rho_g^{\frac{\gamma-1}{2}} + \frac{\gamma-1}{(\gamma+1)}\sqrt{\frac{\rho_g^{\gamma}}{\gamma p_g}}(u_g - c_g)\right]^{\frac{2}{\gamma-1}}\\ p_I = \rho_I^{\gamma}\frac{p_g}{\rho_g^{\gamma}}\\ u_I = u_g + \frac{2}{\gamma-1}(c_g - c_I) \end{cases}$$

avec

$$c_g = \sqrt{\frac{\gamma p_g}{\rho_g}}, \qquad c_I = \sqrt{\frac{\gamma p_I}{\rho_I}}.$$

Dans le cas d'une propagation, la valeur intermédiaire est

$$\mathcal{U}_I = \mathcal{U}_q$$

Il s'agit de résoudre de manière exacte un problème de Riemann entre un état gauche (ρ_g, u_g, p_g) et un état droit qui vérifie $\rho_d = p_d = 0$.

D'une manière générale, la solution du problème de Riemann pour le système de la dynamique des gaz est composé de quatre états constants séparés par trois ondes se propageant aux vitesses λ_i : une onde de raréfaction, une discontinuité de contact et une onde de choc. Avant d'établir la preuve de la proposition, on montre le résultat

Lemme 16

Une onde de choc ne peut pas border le vide.

Preuve. Supposons qu'une onde de choc sépare un état gauche non vide d'un état droit vide, et qu'elle se déplace à la vitesse S. Les relations de Rankine-Hugoniot sur le système 5.40 s'écrivent :

$$\begin{cases} \rho_g u_g - \rho_d u_d = S(u_g - u_d) \\ \rho_g u_g^2 + p_g - (\rho_d u_d^2 + p_d) = S(\rho_g u_g - \rho_d u_d) \\ u_g(W_g + p_g) - u_d(W_d + p_d) = S(W_g - W_d). \end{cases}$$

Or $\rho_d = W_d = 0$, et donc ces relations donnent $u_g = u_d = S$ et $p_g = p_d$, ce qui est incompatible avec un choc.

Preuve de la proposition15. Dans le cas où l'état droite est le vide, la structure de la solution du problème de Riemann consiste en une 1-détente qui vient fusionner avec une discontinuité de contact (Fig. 6.4). A travers cette détente, les invariants de Riemann (i.e. les quantités conservées de part et d'autre de l'onde [20]) sont l'entropie s, proportionnelle à p/p^{γ} , et u + l, avec

$$l = \frac{2c}{\gamma - 1}.\tag{6.6}$$

De l'invariant u + l on déduit que la vitesse de la discontinuité de contact, notée u_d s'écrit

$$u_d = u_g + \frac{2c_g}{\gamma - 1}.$$

C'est la vitesse de propagation de l'interface matière-vide.La vitesse d'onde en amont de la détente est quant à elle donnée par $\lambda_1(\mathcal{U}_g) = u_g - c_g$.

En notant $\xi = \frac{x}{t}$, la solution du problème de Riemann est donnée par

$$\mathcal{U}_R(x,t) = \begin{cases} \mathcal{U}_g \text{ si } \xi < u_g - c_g \\ \mathcal{V}(\xi) \text{ si } u_g - c_g \leq \xi \leq u_d \\ \mathcal{U}_d \text{ si } \xi > u_d. \end{cases}$$



FIGURE 6.4 – Détente dans le vide, solution du problème de Riemann.

La valeur à l'interface est donnée par $\mathcal{U}_I = \mathcal{U}_R(0)$; trois cas se présentent : • Si $u_g - c_g > 0$ (Fig. 6.4-1), les ondes sont sortantes, et

$$\mathcal{U}_I = \mathcal{U}_g$$

Cette situation correspond à une propagation.

• Si $u_d < 0$ (Fig. 6.4-2), les ondes vont de droite à gauche et

$$\rho_I = \rho_d$$
$$p_I = p_d.$$

Cette situation n'a lieu que si $u_g < 0$, et correspond à un recul du plasma, ce qui ne se produit pas dans notre étude.

• Sinon, et là on peut réellement parler d'une détente,

$$\mathcal{U}_I = \mathcal{V}(0).$$

Nous allons maintenant déterminer la valeur de $\mathcal{V}(\mathbf{0})$. Puisque \mathcal{U} est solution de (6.5), \mathcal{V} vérifie

$$(A(\mathcal{V}(\xi)) - \xi I)\mathcal{V}'(\xi) = 0,$$

où A est la matrice jacobienne du système d'Euler, ce qui implique que

$$\begin{cases} \mathcal{V}'(\xi) = \beta r_1(\mathcal{V}(\xi)) \\ \xi = \lambda_1(\mathcal{V}(\xi)), \end{cases}$$
(6.7)

où $A r_1 = (\rho, -c, 0)^t$ est le vecteur propre normalisé de A associée à la valeur propre λ_1 La dérivation de la seconde équation de (6.7) par rapport à ξ donne

$$1 = \nabla \lambda_1(\mathcal{V}(\xi)) \cdot \mathcal{V}'(\xi),$$

 soit

$$\beta \nabla \lambda_1(\mathcal{V}(\xi)) \cdot r_1(\mathcal{V}(\xi)) = 1.$$

Comme

$$\nabla \lambda_1(\mathcal{V}(\xi)) \cdot r_1(\mathcal{V}(\xi)) = -\frac{\gamma+1}{2} \frac{c}{\rho},$$

on a

$$\beta = \frac{-2}{\gamma + 1} \frac{\rho}{c}.$$
(6.8)

Etant donné que l'entropie s est un invariant,

$$\frac{p}{\rho^{\gamma}} = \frac{p_g}{\rho_g^{\gamma}}.\tag{6.9}$$

et donc

$$c = \sqrt{\frac{\gamma p}{\rho}} = \zeta_g \sqrt{\rho^{\gamma - 1}} \tag{6.10}$$

en posant

$$\zeta_g = \sqrt{\frac{\gamma p_g}{\rho_g^{\gamma}}}.$$

De la première équation (6.7) et de l'expression de r_1 on déduit que

$$\frac{\partial \rho}{\partial \xi} = \beta.$$

Les équations (6.8) et (6.10) donnent alors

$$\frac{\partial \rho}{\partial \xi} = \frac{-2}{(\gamma+1)\zeta_g} \rho^{\frac{3-\gamma}{2}}.$$

En intégrant cette relation entre ξ_g et ξ , on obtient

$$\rho(\xi) = \left[\rho_g^{\frac{\gamma-1}{2}} + \frac{\gamma-1}{(\gamma+1)\zeta_g}(\xi_g - \xi)\right]^{\frac{2}{\gamma-1}}.$$

Comme

$$\xi_g = \lambda_1(\mathcal{U}_g) = u_g - c_g,$$

la valeur de la densité à l'interface est

$$\rho_I = \rho(0) = \left[\rho_g^{\frac{\gamma-1}{2}} + \frac{\gamma-1}{(\gamma+1)\zeta_g}(u_g - c_g)\right]^{\frac{2}{\gamma-1}}.$$

A partir des invariants de Riemann, on déduit les valeurs de la pression et de la vitesse à l'interface, p_I et u_I , ce qui achève la démonstration de la Proposition (15).

Connaissant \mathcal{U}_I , on en déduit \mathbf{U}_I , la variable conservative. Le flux numérique à l'interface, noté \mathbf{g}_G est ensuite calculé à partir du flux exact :

$$\mathbf{g}_G(\mathbf{U}_q,\mathbf{U}_d) = \mathbf{F}(\mathbf{U}_I)$$

Dans notre problème, nous avons le plus souvent $u_g - c_g > 0$, de sorte que l'expansion du plasma correspond plus à une propagation qu'à une réelle détente dans le vide.

Remarque. Lors de la mise en oeuvre de cette méthode, il convient de prendre certaines précautions pour ne pas avoir des densités trop faibles : si on n'impose pas un traitement particulier, les densités sur les mailles proches du front de détente (ou de propagation) sont inférieures à la précision machine. On remédie à ce problème en considérant les mailles où la densité est inférieure à une valeur critique ρ_{\min} comme des mailles vides. Si on choisit un ρ_{\min} suffisamment petit, on reste cohérent avec la physique, puisqu'il n'est de toute façon pas possible de mesurer des densités trop faibles.

6.6 Calcul du flux numérique par une méthode sans couplage

6.6.1 Schéma HLLE

Nous avons évoqué dans l'introduction de ce chapitre la nécessité d'utiliser un schéma positif. Nous allons décrire le schéma HLLE ainsi que son extension à l'ordre 2.

Schéma HLLE, ordre 1

C'est un schéma "de type Godunov" [22], basé sur la résolution à chaque interface entre mailles le problème de Riemann suivant :

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = \mathbf{0} \\ \mathbf{U}(x,0) = \mathbf{U}_g & , x < 0 \\ \mathbf{U}(x,0) = \mathbf{U}_d & , x > 0 \end{cases}$$
(6.11)

Quand le système est hyperbolique et convexe (c'est le cas du système que nous étudions, cf. Section 5.3.2), le problème (6.11) admet une unique solution entropique *exacte* dans la classe d'états constants séparés par des ondes simples. Elle est composée de quatre états constants séparés par les trois ondes de vitesse λ_1, λ_2 et λ_3 . Un schéma "de type Godunov" est un schéma qui donne une solution *approchée* de (6.11). En particulier, la méthode HLLE consiste à ne considérer qu'un seul état intermédiaire U^{*} pour passer de \mathbf{U}_g à \mathbf{U}_d ; dans ces conditions, le solveur de Riemann approché est

$$w(\frac{x}{t}) = \begin{cases} \mathbf{U}_g \ \text{si} \ x < b_g t \\ \mathbf{U}^* \ \text{si} \ b_g t < x < b_d t \\ \mathbf{U}_d \ \text{si} \ x > b_d t \end{cases}$$
(6.12)

où b_g (resp. b_d) est une approximation de la plus petite (resp. la plus grande) vitesse d'onde. Pour que U^{*} recouvre bien les deux états intermédiaires de la solution exacte, il faut que

$$\begin{cases} b_g \leq \min(\lambda_i(\mathbf{U}_g), \lambda_i(\mathbf{U}_d)) \\ b_d \geq \max(\lambda_i(\mathbf{U}_g), \lambda_i(\mathbf{U}_d)) \end{cases}, i = 1, 2, 3.$$

L'état intermédiaire U^* est défini de telle sorte que le solveur approché soit consistant



FIGURE 6.5 – Solution approchée du problème de Riemann

avec la forme intégrale de la loi de conservation, c'est-à-dire

$$\int_{-\frac{\Delta x}{2}}^{\frac{\Delta x}{2}} w\left(\frac{x}{t}\right) dx = \frac{\Delta x}{2} (\mathbf{U}_g + \mathbf{U}_d) - \Delta t (\mathbf{F}(\mathbf{U}_d) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_g)), \tag{6.13}$$
sous la condition CFL

$$\frac{\Delta t}{\Delta x} \max(\lambda_i(\mathbf{U}_g), \lambda_i(\mathbf{U}_d)) \le \frac{1}{2}.$$

Avec la définition (6.12), la résolution de (6.13) donne

$$\mathbf{U}^* = \frac{b_d \mathbf{U}_d - b_g \mathbf{U}_g}{b_d - b_g} - \frac{\mathbf{F}(\mathbf{U}_d) - \mathbf{F}(\mathbf{U}_g)}{b_d - b_g}$$

Comme tous les schémas de type Godunov, le schéma HLLE peut s'écrire sous forme conservative, et son flux numérique, noté \mathbf{g}_H , est défini par

$$\mathbf{g}_{H}(\mathbf{U}_{g},\mathbf{U}_{d}) = \begin{cases} \mathbf{F}(\mathbf{U}_{g}) & \text{si } 0 < b_{g} \\ \frac{b_{d}\mathbf{F}(\mathbf{U}_{g}) - b_{g}\mathbf{F}(\mathbf{U}_{d})}{b_{d} - b_{g}} + \frac{b_{d}b_{g}(\mathbf{U}_{d} - \mathbf{U}_{g})}{b_{d} - b_{g}} & \text{si } b_{g} < 0 < b_{d} \\ \mathbf{F}(\mathbf{U}_{d}) & \text{si } b_{d} < 0 \end{cases}$$

ou, plus simplement par

$$\mathbf{g}_{H}(\mathbf{U}_{g},\mathbf{U}_{d}) = \frac{b^{+}\mathbf{F}(\mathbf{U}_{g}) - b^{-}\mathbf{F}(\mathbf{U}_{d})}{b^{+} - b^{-}} + \frac{b^{+}b^{-}(\mathbf{U}_{d} - \mathbf{U}_{g})}{b^{+} - b^{-}}.$$
(6.14)

en définissant b^+ et b^- par

$$b^+ = \max(0, b_d)$$
$$b^- = \min(0, b_g)$$

Pour calculer le flux à l'interface entre les mailles M_j et M_{j+1} , on prend $\mathbf{U}_g = \mathbf{U}_j, \mathbf{U}_d = \mathbf{U}_{j+1}$ et

$$\begin{cases} b^{-} = \min(0, \lambda_i(\mathbf{U}_j), \lambda_i(\mathbf{U}_{j+1})) \\ b^{+} = \max(0, \lambda_i(\mathbf{U}_j), \lambda_i(\mathbf{U}_{j+1})) \end{cases}, i = 1, 2, 3.$$

Passage à l'ordre 2 : méthode MUSCL

Il est possible de dériver à partir de ce schéma un schéma d'ordre 2. Pour cela, on utilise une méthode de type "limiteur de pente" [31][48][37]. Cette méthode consiste à résoudre le problème de Riemann aux interfaces non plus avec des fonctions constantes par morceaux, mais avec les traces sur l'interface de fonctions linéaires par cellule. Cette méthode se compose de trois étapes :

1. Reconstruction d'une fonction linéaire par maille à partir de la solution au temps n, et détermination de ses traces sur les interfaces, $\mathbf{U}_{i-1/2}^+$ et $\mathbf{U}_{i+1/2}^-$. Cette fonction est définie par

$$\mathbf{\tilde{U}}(x,t^n) = \mathbf{U}_i^n + \sigma_i^n(x-x_i)$$
 sur la maille M_i ,

où σ_i^n est un triplet de pentes pour les composantes de U, qui sera déterminé plus loin. Les traces de cette fonction sont donc

$$\begin{cases} \mathbf{U}_{i-1/2}^{+} = \tilde{\mathbf{U}}(x_{i-1/2}, t^{n}) = \mathbf{U}_{i}^{n} - \frac{1}{2}\delta_{i} \\ \mathbf{U}_{i+1/2}^{-} = \tilde{\mathbf{U}}(x_{i+1/2}, t^{n}) = \mathbf{U}_{i}^{n} + \frac{1}{2}\delta_{i} \end{cases} \text{ en notant } \delta_{i} = \sigma_{i}^{n}\Delta x.$$



FIGURE 6.6 – Schéma HLLE, ordre 2.

2. Calcul de

$$\bar{\mathbf{U}}_{i} = \mathbf{U}_{i}^{n} - \frac{\Delta t}{2\Delta x} \left(\mathbf{F} \left(\mathbf{U}_{i+1/2}^{-} \right) - \mathbf{F} \left(\mathbf{U}_{i-1/2}^{+} \right) \right)$$

puis reconstruction de cette fonction constante par maille, comme dans l'étape 1

$$\begin{cases} \bar{\mathbf{U}}_{i-1/2}^{+} = \bar{\mathbf{U}}_{i} - \frac{1}{2}\bar{\delta}_{i} \\ \bar{\mathbf{U}}_{i+1/2}^{-} = \bar{\mathbf{U}}_{i} + \frac{1}{2}\bar{\delta}_{i} \end{cases}$$

3. Détermination des solutions du problème de Riemann

$$\begin{aligned} \mathbf{U}_t + \mathbf{F}(\mathbf{U})_x &= 0 \\ \mathbf{U}(x,0) &= \left\{ \begin{array}{l} \bar{\mathbf{U}}_{i+1/2}^- & \text{si } x < 0 \\ \bar{\mathbf{U}}_{i+1/2}^+ & \text{si } x > 0 \end{array} \right\} \end{aligned}$$

en utilisant le flux du premier ordre (6.14) en remplaçant $\mathbf{U}_g, \mathbf{U}_d$ par $\mathbf{\bar{U}}_{i+1/2}^-, \mathbf{\bar{U}}_{i+1/2}^+$.

Il s'agit maintenant de déterminer les composantes du vecteur pente δ_i . Pour cela, on étend des résultats scalaires au cas d'un système, en notant μ chaque composante de **U**. Il s'agit de choisir ces composantes telles que

- la variation totale¹ soit décroissante

- il n'y ait pas de création d'extrema.

Ces conditions sont vérifiées si on impose que

$$\mu_{i-1/2}^+ \in [\mu_i, \frac{\mu_i + \mu_{i-1}}{2}],$$

$$\mu_{i+1/2}^- \in [\mu_i, \frac{\mu_i + \mu_{i+1}}{2}].$$

On déduit de ce choix que

$$\delta_i = \operatorname{minmod}(\mu_{i+1} - \mu_i, \mu_i - \mu_{i-1}),$$

1. définie par $TV(\mu) = \sum (\mu_{i+1} - \mu_i)$

en définissant la fonction minmod par

$$\operatorname{minmod}(x, y) = \begin{cases} \operatorname{signe}(x) \min(|x|, |y|) \text{ si } x \text{ et } y \text{ sont de même signe,} \\ 0 \text{ sinon.} \end{cases}$$

Cette méthode est ainsi conservative et TVD (résultats vérifiés dans le cas scalaire).

Il est alors possible d'exécuter les étapes 1, 2 et 3 ; le flux numérique du schéma du second ordre s'écrit

$$\mathbf{g}_{H}(\mathbf{U}_{i},\mathbf{U}_{i+1}) = \mathbf{g}_{H}(\bar{\mathbf{U}}_{i+1/2}^{-},\bar{\mathbf{U}}_{i+1/2}^{+}) = \frac{b_{d}\mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}}_{i+1/2}^{-}) - b_{g}\mathbf{F}(\bar{\mathbf{U}}_{i+1/2}^{+})}{b_{d} - b_{g}} + \frac{b_{d}b_{g}(\bar{\mathbf{U}}_{i+1/2}^{+} - \bar{\mathbf{U}}_{i+1/2}^{-})}{b_{d} - b_{g}},$$

c'est-à-dire que

$$\mathbf{U}_{i}^{n+1} = \mathbf{U}_{i}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{g}_{H}(\bar{\mathbf{U}}_{i+1/2}^{-}, \bar{\mathbf{U}}_{i+1/2}^{+}) - \mathbf{g}_{H}(\bar{\mathbf{U}}_{i-1/2}^{-}, \bar{\mathbf{U}}_{i-1/2}^{+}) \right).$$

6.6.2 Application

Nous utilisons le schéma HLLE au premier ordre sur le domaine "non vide", et le schéma de Godunov à l'interface matière/vide. On calcule donc à chaque itération

$$\mathbf{U}_{i}^{n+1} = \mathbf{U}_{i}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left(\mathbf{g}_{i+1/2} - \mathbf{g}_{i-1/2} \right).$$

Si on désigne par i_0 le dernier nœud avant le vide, le flux considéré est

$$\begin{cases} \mathbf{g}_{i+1/2} = \mathbf{g}_H(\mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1}) \text{ pour } i = 0, ..., i_0 \\ \mathbf{g}_{i_0+1} = \mathbf{g}_G(\mathbf{U}_{i_0}, \mathbf{0}) \\ \mathbf{g}_{i+1/2} = \mathbf{g}_H(\mathbf{U}_i, \mathbf{U}_{i+1}) = 0 \text{ pour } i = i_0 + 1, ..., K \end{cases}$$

Nous parlons ici de *méthode sans couplage* dans la mesure où l'on ne fait pas de distinction explicite entre la zone de chauffage et la zone d'extension, et par opposition à la méthode présentée dans la Section 6.7.

Définition d'un cas test

Nous avons vu dans le chapitre précédent comment déterminer les conditions limites à gauche (Section 5.3.3). <on considère une température de 1,5 eV, soit

$$T_a \simeq 17\,250\,\mathrm{K}$$
.

Le flux entrant de molécules d'hydrogène est

$$\varphi_g = 0,25 \,\mathrm{mol.cm}^{-2} \mathrm{s}^{-1},$$

 soit

$$\varphi_g = 1,5 \, 10^{23} \text{ molécules.cm}^{-2} \text{s}^{-1} = 3 \, 10^{27} \text{ atomes.cm}^{-2} \text{s}^{-1}.$$

On en déduit la vitesse des ions, la densité de particules, la densité de masse et la pression :

$$\begin{split} \rho_g &= 4,1\,10^{-4}\,\mathrm{kg.m^{-3}}\\ u_g &= 1,19\,10^4\,\mathrm{m.s^{-1}},\\ n_g &= 2,5\,10^{23}\,\mathrm{m^{-3}},\\ p_q &= 5,98\,\,10^5\,\mathrm{Pa}\,. \end{split}$$

Pour n_g et T_g ainsi donnés, la fréquence de collision ν_{ei} vaut 1,610¹² s (cf Annexe A). La densité du courant extérieur est

$$J_0 = 10^9 \text{ A.m}^{-2}.$$

On définit alors un cas test sur $\Omega = [0, 1]$, caractérisé par le pas d'espace $\Delta x = 10^{-3}$ (1000 mailles) et le pas de temps $\Delta t = 10^{-10}$ (unités S.I.). On a l = 50 (nombre de mailles sur la zone de chauffage), de sorte que $x_l = 50, 5 \, 10^{-3}$. La position de l'interface est matérialisée sur les résultats. L'initialisation est celle résumée sur la Figure (6.1) (zone d'expansion vide). Trois définitions possibles du courant sont envisagées (cf. Section 6.3) :

- un courant lissé sur 10 mailles ($\varepsilon = 10^{-2}$).
- un courant lissé sur 5 mailles ($\varepsilon = 5 \, 10^{-3}$).
- un courant non lissé.

Analyse des résultats

Pour ces trois cas, nous représentons sur la Figure 6.7 la température, la densité de masse, la vitesse et la pression au temps $10\,000\,\Delta t$. La position du front du plasma est en x = 0, 17. Nous pouvons faire plusieurs remarques sur la température. La couche limite est bien visible, puisqu'on passe de $1, 5 \,\text{eV}$ à $52, 5 \,\text{eV}$ sur une maille. Le chauffage a lieu essentiellement avant que le courant ne commence à être lissé $(J_0 = J_0^0)$, et il porte la plasma à la même température maximale dans les trois cas. Par contre, il y a peu de diffusion à travers l'interface, et la température du plasma chute brusquement à l'entrée de la zone d'expansion, d'autant plus que le courant est moins lissé. D'autre part, on observe juste après l'interface une remontée de la température qui n'est pas physique. Dans le cas extrême d'un courant sans lissage, la température est voisine de 0 entre l'interface et cette remontée. D'ailleurs, on obtient un peu plus tard (itération 12000) des températures négatives, ce qui montre bien que la méthode de résolution n'est pas compatible avec cette définition du courant.

Pour comprendre l'origine de ces problèmes, nous étudions les valeurs propres : on les représente dans les trois cas sur la Figure 6.8, en donnant leur valeur sur Ω au temps 10 000 Δt et en indiquant leur évolution au cours du temps de part et d'autre de l'interface, sur les nœuds l et l + 1.

On constate qu'il y a dans la zone de chauffage à la fois des points résonnants (croisement des courbes noire et rouge, correspondant à $\lambda_1 = \lambda_2$, cf. Section 5.3.2) et des points soniques puisque λ_1 et λ_2 s'annulent. Dans les deux cas avec lissage, les valeurs propres ont un comportement similaire. On peut remarquer qu'au voisinage du front du plasma, les trois valeurs propres sont positives, c'est-à-dire que la progression du plasma correspond à une propagation, et non à une détente (cf. Section 6.5).

Quand le courant n'est pas lissé, les valeurs propres λ_1 et λ_2 se croisent au nœud l au temps 9000 Δt , et au-delà de cet instant les trois valeurs propres mesurées au nœud l+1 sont égales, c'est-à-dire que c = 0 : il n'y a plus "d'information" qui franchit l'interface, ce qui explique que le chauffage n'a plus d'influence sur la zone d'expansion.

Des méthodes de Lagrange-projection pour la résolution numérique ont été mises en œuvre par Kim-Claire Le Thanh [30]. Dans ce cas également, on a les mêmes solutions non physiques. Or l'écriture du système en coordonnées lagrangiennes présente l'avantage de faire disparaître les points soniques dans la zone de chauffage (les valeurs propres deviennent $-\sqrt{\gamma p\rho}$, $-\alpha$ et $\sqrt{\gamma p\rho}$) : ce ne sont donc pas les points soniques qui sont à l'origine du mauvais comportement de la solution. Nous allons dans la suite proposer une méthode permettant d'éviter l'apparition des résonnances et donc la perte d'hyperbolicité du système.

Remarque 1. La Figure (6.9) illustre l'intérêt d'utiliser la formulation en entropie (système (5.42)) plutôt que la formulation en énergie (système (5.40)). On représente la température et la densité pour des courants lissés sur 10 mailles puis sur 40 mailles, soit sur quasiment toute la zone de chauffage. Remarquons déjà que pour le lissage sur 40 mailles la température maximale est de 51,75 eV, légèrement inférieure à la température du plateau dans les autres cas de lissages (cf. Fig. 6.7), et que dans ce cas la remontée de température après l'interface est à peine perceptible. Il y a peu de différences entre les deux formulations. Par contre, avec le lissage sur 10 mailles, même si le profil global de la température ne change pas, on peut noter certaines nuances en aval de l'interface : la position du front du plasma est différente, et la température décroît plus régulièrement vers 0 avec la formulation entropique. D'autre part, les changements de monotonie de la température sont eux aussi plus "lisses" avec cette formulation.

Remarque 2. Pour ce cas test, il n'est pas nécessaire de mettre en œuvre un traitement particulier pour la couche limite. Cette procédure se révèle toutefois indispensable si on augmente la valeur du courant extérieur. On représente sur la Figure 6.10 la température obtenue avec un raffinement de 10 sous-mailles sur la première maille (courbe rouge). Elle est semblable à la température calculée sans raffinement (courbe noire).

Remarque 3. L'utilisation de schémas numériques du second ordre conduit également à l'apparition de poins résonnants et à des solutions aussi peu satisfaisantes d'un point de vue physique [30].



FIGURE 6.7 – Solution à $t = 10000\Delta t \ (1\mu s)$ en fonction de la définition du courant extérieur.



FIGURE 6.8 – Valeurs propres en fonction de la définition du courant extérieur.



FIGURE 6.9 – Intérêt de la formulation entropique



FIGURE 6.10 - Traitement de la couche limite : raffinement sur la première maille.

6.7 Méthode de couplage de schémas

6.7.1 Principe du couplage

Nous considérons la partie homogène du système "en entropie" (5.42). Puisque la fonction α est définie par

$$\alpha(x) = \begin{cases} \frac{m_i J_0(x)}{e} & \text{si } x \le x_l \\ 0 & \text{si } x > x_l \end{cases},$$

nous sommes amenés à résoudre deux systèmes différents :

• Pour $x \leq x_l$, on cherche

$$\mathbf{U} = (\rho, \rho u, \rho s)$$

solution de

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} = 0\\ \frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0\\ \frac{\partial (\rho s)}{\partial t} + \frac{\partial }{\partial x} ((\rho u - \alpha) s) = 0 \end{cases}$$
(6.15)

Rappelons qu'il faut compléter ce système par le terme source

$$\mathcal{T} = \left(0, 0, \frac{\gamma - 1}{\gamma} \frac{m_e \nu_{ei} \alpha^2}{m_i} \frac{p^{1/\gamma - 1}}{\rho}\right)^t$$

dont le traitement explicite ne diffère pas de ce qui est fait dans la méthode sans couplage.

• Pour $x > x_l$, on cherche U solution du système de la dynamique des gaz

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u)}{\partial x} = 0\\ \frac{\partial (\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u^2)}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial x} = 0\\ \frac{\partial (\rho s)}{\partial t} + \frac{\partial }{\partial x} (\rho u s) = 0. \end{cases}$$
(6.16)

En notant \mathbf{F}_G et \mathbf{F}_D les flux respectivement associés à ces deux systèmes, nous devons donc résoudre le système écrit sous la forme générique

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbb{F}(\mathbf{U})}{\partial x} = \mathbf{0}$$

avec

$$\begin{cases} \mathbb{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{F}_G(\mathbf{U}) &, \text{ si } x \leq x_l \\ \mathbb{F}(\mathbf{U}) = \mathbf{F}_D(\mathbf{U}) &, \text{ si } x > x_l \end{cases}$$

On note \mathbf{g}_G , \mathbf{g}_D et \mathbf{g} les flux numériques calculés respectivement à partir de \mathbf{F}_G , \mathbf{F}_D et \mathbb{F} . Connaissant \mathbf{U}^n , le calcul de \mathbf{U}^{n+1} est standard en dehors des nœuds voisins de l'interface, si bien que pour j allant de 1 à l-1 on a

$$\mathbf{U}_j^{n+1} = \mathbf{U}_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{g}_G(\mathbf{U}_j^n, \mathbf{U}_{j+1}^n) - \mathbf{g}_G(\mathbf{U}_{j-1}^n, \mathbf{U}_j^n)],$$

et pour j compris entre l+2 et K on a

$$\mathbf{U}_{j}^{n+1} = \mathbf{U}_{j}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{g}_{D}(\mathbf{U}_{j}^{n}, \mathbf{U}_{j+1}^{n}) - \mathbf{g}_{D}(\mathbf{U}_{j-1}^{n}, \mathbf{U}_{j}^{n})].$$

Il s'agit maintenant de proposer un moyen de coupler les deux schémas à l'interface entre les mailles M_l et M_{l+1} . A cette fin, nous calculons *deux flux numériques* à cette interface : un en supposant que x_l et x_{l+1} sont "à gauche", auquel cas nous sommes amenés à utiliser le flux numérique $\mathbf{g}_G(\mathbf{U}_l^n, \mathbf{U}_{l+1}^n)$, l'autre en supposant que ces deux noeuds sont "à droite", de sorte que nous nous servons de $\mathbf{g}_D(\mathbf{U}_l^n, \mathbf{U}_{l+1}^n)$:

$$\mathbf{U}_{l}^{n+1} = \mathbf{U}_{l}^{n} - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\underline{\mathbf{g}}_{G}(\mathbf{U}_{l}^{n}, \mathbf{U}_{l+1}^{n}) - \mathbf{g}_{G}(\mathbf{U}_{l-1}^{n}, \mathbf{U}_{l}^{n})]$$

 et

$$\mathbf{U}_{l+1}^{n+1} = \mathbf{U}_{l+1}^n - \frac{\Delta t}{\Delta x} [\mathbf{g}_D(\mathbf{U}_{l+1}^n, \mathbf{U}_{l+2}^n) - \underline{\mathbf{g}_D(\mathbf{U}_l^n, \mathbf{U}_{l+1}^n)}]$$

Nous illustrons cette procédure sur la Figure 6.11.



FIGURE 6.11 – Schématisation du couplage à l'interface.

Une façon d'interpréter cette méthode est de voir \mathbf{U}_l^n comme une condition limite gauche pour la zone d'expansion, et \mathbf{U}_{l+1}^n comme une condition à droite pour la zone de chauffage; c'est une méthode de couplage avec recouvrement.

Dans la pratique, pour résoudre notre problème, nous utilisons le flux numérique du schéma HLLE à gauche et à droite, calculé à partir de f_g ou de f_d . Le schéma global est consistant, mais il n'est pas conservatif. En effet, puisque le schéma HLLE est consistant, on a

$$\mathbf{g}_G(\mathbf{U}, \mathbf{U}) = \mathbf{F}_G(\mathbf{U})$$
 si $x < x_l$

 et

$$\mathbf{g}_D(\mathbf{U},\mathbf{U}) = \mathbf{F}_D(\mathbf{U}) \text{ si } x > x_l,$$

et donc $\mathbf{g}(\mathbf{U}, \mathbf{U}) = \mathbb{F}(\mathbf{U})$ pour tout x. Cependant, la valeur du flux numérique global à l'interface, $\mathbf{g}(\mathbf{U}_l^n, \mathbf{U}_{l+1}^n)$, n'est pas défini de manière unique, d'où la non conservativité. D'autres résultats plus généraux concernant cette procédure de couplage seront données

dans l'Annexe C. Nous verrons également, à titre d'exemple, l'application (formelle) d'un de ces résultat à notre problème.

Remarque 1. Si on utilise la formulation en énergie de (6.15) et (6.16) (système 5.40), le couplage introduit une discontinuité non seulement sur la fonction flux correspondante, mais sur la variable aussi, comme cela est résumé dans le tableau suivant.

	flux	variable
gauche	$W - \alpha u$	$(W+p-\frac{\alpha u}{2})u-\frac{\gamma \alpha}{\gamma-1}\frac{p}{\rho}$
droite	W	(W+p)u

C'est pour cette raison que nous avons préféré utiliser la formulation en entropie. Avec la formulation en énergie, il ne serait en particulier pas possible de vérifier la consistance du schéma global.

Remarque 2. Une procédure de couplage analogue a été introduite indépendamment par Abgrall et Karni pour le traitement numérique d'une discontinuité de contact entre deux fluides ayant des équations d'état différentes [1].

6.7.2 Estimation d'erreur

Le but de cette section est d'estimer l'erreur que l'on commet en utilisant la méthode avec couplage, non conservative, plutôt que la méthode conservative sans couplage. Pour cela, nous supposons que la valeur de \mathbf{U}^n est connue, et nous regardons quelles sont les différences sur \mathbf{U}^{n+1} suivant la méthode utilisée. Les deux méthodes ne diffèrent que par la troisième composante du flux numérique calculé en l + 1/2, et donc par la valeur de l'entropie spécifique $(\rho s)^{n+1}$ aux nœuds l et l + 1. Nous notons g_D (resp. g_G) la troisième composante du flux numérique \mathbf{g}_D (resp. \mathbf{g}_G), et nous différencions les grandeurs associées à la méthode conservative en les écrivant sous la forme générique \bar{x} .

Erreur sur \mathbf{U}_l^{n+1} .

Le flux numérique en l + 1/2 "vu de la gauche" avec couplage est donné par

$$g_G(\mathbf{U}_l, \mathbf{U}_{l+1}) = \frac{b^+((\rho_l u_l - \alpha)s_l) - b_G^-((\rho_{l+1} u_{l+1} - \alpha)s_{l+1})}{b^+ - b_G^-} + \frac{b^+ b_G^-(\rho_{l+1} s_{l+1} - \rho_l s_l)}{b^+ - b_G^-}.$$

avec

$$b^{+} = \max(0, u_{l} + c_{l}, u_{l+1} + c_{l+1})$$

$$b_{G}^{-} = \min(0, u_{l} - c_{l}, u_{l+1} - c_{l+1}, u_{l} - \frac{\alpha}{\rho_{l}}, u_{l+1} - \frac{\alpha}{\rho_{l+1}}),$$

tandis que le flux sans couplage est donné par

$$\bar{g}(\mathbf{U}_l, \mathbf{U}_{l+1}) = \frac{\bar{b}^+(\rho_l u_l - \alpha)s_l - \bar{b}^-(\rho_{l+1} u_{l+1} s_{l+1})}{\bar{b}^+ - \bar{b}^-} + \frac{\bar{b}^+ \bar{b}^-(\rho_{l+1} s_{l+1} - \rho_l s_l)}{\bar{b}^+ - \bar{b}^-}$$
(6.17)

avec

$$\bar{b}^{+} = \max(0, u_{l} + c_{l}, u_{l+1} + c_{l+1})$$
$$\bar{b}^{-} = \min(0, u_{l} - c_{l}, u_{l+1} - c_{l+1}, u_{l} - \frac{\alpha}{\rho_{l}})$$

Nous remarquons que $\bar{b}^+ = b^+$ et que $\bar{b}_G^- \leq \bar{b}^-$. Nous faisons en outre l'hypothèse simplificatrice que

$$u_l - c_l < u_l - \frac{\alpha}{\rho_l} \tag{6.18}$$

 et

$$u_{l+1} - c_{l+1} < u_{l+1} - \frac{\alpha}{\rho_{l+1}}$$

de sorte que

$$b_G^- = \bar{b}^-.$$

Cette supposition correspond à la situation généralement observée dans notre problème (voir Figure 6.8). La différence entre les deux flux est alors

$$\Delta g_G = \bar{g}(\mathbf{U}_l, \mathbf{U}_{l+1}) - g_G(\mathbf{U}_l, \mathbf{U}_{l+1}) = -\alpha \frac{b^-}{b^+ - b^-} s_{l+1}^n \ge 0$$

et la différence sur la variable est

$$(\bar{\rho}\bar{s})_l^{n+1} - (\rho s)_l^{n+1} = -\frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta g_G.$$

Comme il n'y a pas d'erreur sur la première composante du flux, on a $\bar{\rho}_{l+1}^{n+1} = \rho_{l+1}^{n+1}$ de sorte que l'erreur sur l'entropie est

$$\Delta s_l^{n+1} = \bar{s}_l^{n+1} - s_l^{n+1} = \frac{1}{\rho_l^{n+1}} \frac{\Delta t}{\Delta x} \alpha \frac{b^-}{b^+ - b^-} s_{l+1}^n \le 0.$$
(6.19)

Erreur sur \mathbf{U}_{l+1}^{n+1}

Ecrivons maintenant le flux numérique de la méthode de couplage "vu de la droite" :

$$g_D(\mathbf{U}_l, \mathbf{U}_{l+1}) = \frac{b^+(\rho_l u_l)s_l - b_D^-(\rho_{l+1} u_{l+1})s_{l+1}}{b^+ - b_D^-} + \frac{b^+ b_D^-(\rho_{l+1} s_{l+1} - \rho_l s_l)}{b^+ - b_D^-},$$

avec

$$b_D^- = \min(0, u_l - c_l, u_{l+1} - c_{l+1}),$$

et le flux sans couplage reste bien sûr identique, donné par (6.17). L'hypothèse (6.18) étant toujours valable, on a $b_D^- = \bar{b}^-$ et la différence entre les deux flux s'écrit

$$\Delta g_D = \bar{g}(\mathbf{U}_l, \mathbf{U}_{l+1}) - g_G(\mathbf{U}_l, \mathbf{U}_{l+1}) = -\alpha \frac{b^+}{b^+ - b^-} s_l < 0,$$

de sorte que la différence sur la variable devient

$$\Delta s_{l+1}^{n+1} = \bar{s}_{l+1}^{n+1} - s_{l+1}^{n+1} = \frac{\Delta t}{\Delta x} \Delta g_D = -\frac{1}{\rho_{l+1}^{n+1}} \frac{\Delta t}{\Delta x} \alpha \frac{b^+}{b^+ - b^-} s_l^n < 0.$$
(6.20)

Il est tout d'abord évident que Δg_D , Δs_{l+1}^{n+1} , Δg_G et Δs_l^{n+1} tendent vers 0 quand α tend vers 0. Le couplage permet de diminuer le flux qui sort de la zone de chauffage par rapport à la méthode conservative ($\Delta g_G \geq 0$) et d'augmenter le flux qui entre dans la zone d'expansion ($\Delta g_D < 0$). Cela se traduit par une surestimation de l'entropie sur les nœuds limites l et l + 1 (résultats). Par ailleurs, l'erreur sur l'entropie est en $O(\Delta t)$, c'est-à-dire du même ordre que la précision du schéma HLLE.

Examinons un cas particulier qui se produit quand toutes les valeurs propres sont positives, de sorte que

$$b^{-} = 0.$$

Dans ce cas, (6.19) et (6.20) donnent

$$\begin{split} \Delta s_l^{n+1} &= 0, \\ \Delta s_{l+1}^{n+1} &= -\frac{1}{\rho_{l+1}^{n+1}} \frac{\Delta t}{\Delta x} \alpha s_l^n \end{split}$$

Lors des itérations suivantes, les deux méthodes donneront toujours la même entropie au nœud l. Sur le nœud l + 1, l'erreur sur l'entropie ne dépendra que de l'entropie en l à l'itération précédente, de sorte que l'erreur sur s_{l+1} ne s'amplifie pas : pour tout k > 2, on a

$$\Delta s_{l+1}^{n+k} = -\frac{1}{\rho_{l+1}^{n+1}} \frac{\Delta t}{\Delta x} \alpha s_l^{n+k-1}.$$

Nous allons voir dans la section suivante en quoi ces estimations d'erreurs peuvent nous aider à comprendre les résultats obtenus à l'aide de la méthode de couplage.

6.7.3 Validation de la méthode

Le cas test est le même que celui décrit dans la Section 6.6.2. Si le courant est lissé, la valeur de α sur le nœud qui précède l'interface est faible, et donc l'erreur estimée dans la section précédente entre les méthodes avec et sans couplage est faible. Nous vérifions sur la Figure 6.12 que c'est effectivement le cas. On considère un lissage sur 10 mailles, et on représente la température, la densité et les valeurs propres λ_1 et λ_2 au temps 10 000 Δt obtenues avec les deux méthodes. On ne constate de différences que dans la zone d'expansion, au voisinage de l'interface. On est précisément dans le cas où $b^- = 0$, puisque toutes les valeurs propres sont positives au voisinage de l'interface. Dans ce cas, la méthode de couplage ne procure pas d'amélioration, étant donné qu'il y a toujours des points résonnants, et que la solution reste non physique.

Nous allons maintenant envisager un courant discontinu à l'interface qui, on l'a vu dans la Section 6.6.2, n'est pas compatible avec la méthode sans couplage. Sur la Figure 6.13, nous représentons les variables, toujours au même temps, ainsi que les valeurs propres. Il n'y a plus de points résonnants, de sorte que le système qu'on résout est bien hyperbolique. L'ordre des valeurs propres reste $u - c < \lambda_2 < u + c$, des deux côtés de l'interface. De plus, λ_1 et λ_2 sont négatives dans la zone de chauffage (on n'a plus $b^- = 0$). Le saut sur λ_2 s'explique par le fait que cette valeur propre est égale à

$$u - \frac{\alpha}{\rho} = u - \frac{J_0^0}{en}$$

dans la zone de chauffage et à u dans la zone d'expansion. Les deux autres valeurs propres restent continues.

Le profil de la température correspond plus à l'intuition physique : le chauffage se diffuse mieux dans la zone d'expansion, et il n'y a plus cette remontée de température que nous avions observée avec des courants lissés.

On trace sur la Figure (6.15) l'entropie, la quantité de mouvement et la masse totales en fonction du temps pour les deux méthodes (avec et sans couplage) : dans les deux cas, il y a conservation rigoureuse de la masse et de la quantité de mouvement. Par contre, l'entropie croît plus vite quand on utilise la méthode avec couplage. C'est conforme avec la surestimation de l'entropie de part et d'autre de l'interface, établie dans la section précédente.

Remarque. Comme nous l'avions fait pour la méthode sans couplage, nous pouvons comparer les résultats obtenus à partir de la formulation en entropie du système et de sa formulation en énergie, avec un courant non lissé (Fig. 6.14). Ici aussi, la formulation entropique donne de meilleurs résultats : la forme du front d'expansion est plus régulière, et on évite le point d'inflexion que l'on peut observer ($x \simeq 0.1$) avec la formulation en énergie lors du refroidissement du plasma.



FIGURE 6.12 – Comparaison méthode avec couplage et méthode sans couplage; lissage sur 10 mailles.



FIGURE 6.13 – Solution et valeurs propres pour la méthode avec couplage; absence de lissage.



FIGURE 6.14 – Grandeurs conservées, méthodes avec et sans couplage.



FIGURE 6.15 – Comparaison système en entropie et système en énergie.

Conclusion de la deuxième partie

La deuxième partie de cette thèse prend place dans un ensemble d'études conduites par le Département de Physique Théorique et Appliquée dans le but de comprendre le fonctionnement d'une source d'ions. Ces ions sont extraits d'un plasma formé au voisinage d'une anode à la suite de l'établissement d'un courant entre une cathode et cette anode. Nous nous sommes consacrés à l'étude de la formation du plasma d'anode par ionisation d'un gaz d'hydrogène et à son chauffage par le courant extérieur, ainsi qu'à son expansion dans le vide. Le but de ce travail est de proposer un modèle susceptible de décrire ces phénomènes, et des outils numériques pour les résoudre. Une des particularités de ce problème est qu'il s'agit de décrire un milieu dense qui est d'un côté gazeux et froid, et de l'autre totalement ionisé et chaud, alors qu'un grand nombre d'études en physique des plasmas peuvent se limiter à l'un ou l'autre de ces deux milieux. A notre connaissance, peu d'études équivalentes ont été menées. Des résultats expérimentaux peuvent fournir un moyen de validation, mais avant d'aboutir à un modèle et un code de simulation suffisamment complets pour pouvoir être confrontés à l'expérience, il est nécessaire de progresser avec précaution, ce qui revient à complexifier le modèle par étapes, en faisant évoluer les méthodes de résolution numérique en parallèle. L'inconvénient d'une telle démarche est que certaines difficultés numériques peuvent n'être liées qu'à la simplicité transitoire du modèle. Nous avons choisi de conclure en reprenant le travail effectué dans un ordre chronologique qui diffère de l'organisation de ce document.

Le plasma étant très dense, nous avons opté dans cette partie sur une modélisation hydrodynamique qui conduit à la résolution de systèmes de lois de conservation. Nous avons commencé par élaborer un modèle volontairement très simple (une seule vitesse, "modèle 1") qui est présenté dans [36]. Il nous a servi à mettre au point une méthode basée sur la résolution d'un problème de Riemann exact sur un système hyperbolique pour décrire l'expansion dans le vide d'un plasma neutre, qu'il s'agisse d'une propagation ou d'une détente. Nous avons ensuite élaboré un modèle totalement ionisé à deux espèces (protons et électrons) qui permet en plus de prendre en compte le chauffage du plasma par le courant extérieur ("modèle 2"). Cette amélioration du modèle se traduit par une détérioration des propriétés mathématiques du système obtenu : certes il peut toujours être écrit sous forme conservative, mais il n'est plus que faiblement hyperbolique du fait de la présence de points résonnants, ce qui laisse présager de difficultés lors de la résolution, que nous effectuons dans le cas monodimensionnel plan à l'aide d'approximations par différences finies. Le chauffage du plasma conduit à la formation d'une couche limite pour laquelle nous avons proposé un traitement adéquat, et nécessite l'utilisation d'un schéma positif tel que le schéma HLLE. La mise en œuvre classique de ce schéma se traduit par l'apparition de résonnances dans le système et donne des solutions non physiques. Nous proposons une méthode qui consiste à coupler deux fonctions flux sur l'interface qui sépare la zone de chauffage du plasma et la zone d'expansion libre, découplée du courant extérieur. Cette méthode, en évitant la formation des résonnances, permet de conserver l'hyperbolicité du modèle et conduit à l'obtention de solutions plus conformes à l'intuition physique. Nous avons ensuite complexifié le modèle dans le but de prendre en compte les collisions entre particules et la formation du plasma par ionisation du gaz ("modèle 3"). C'est un modèle à trois espèces et à deux températures. Si on suppose qu'on est hors ETL, les propriétés d'hyperbolicité de ce modèle sont les mêmes que celles du "modèle 2". Pour obtenir une formulation conservative de ce système, il a fallu écrire les lois de conservation de l'énergie sous forme entropique, ce qui est possible car nous considérons qu'il n'y a pas de choc. En fait, nous avons vérifié que la formulation en entropie appliquée au "modèle 2" donnait de meilleurs résultats.

Les travaux menés actuellement au Service de Physique des Plasmas et d'Electromagnétisme par K. C. Le Thanh [30] visent à résoudre ce modèle, toujours dans le cas monodimensionnel plan. La difficulté est que les échelles de temps des phénomènes d'ionisation sont faibles devant celles du chauffage et de l'expansion du plasma. Le terme source, jusqu'ici traité de manière explicite, a dû être implicité. Des modèles de surface libre en coordonnées de Lagrange sont également en cours d'étude.

Les perspectives à plus long terme sont nombreuses. Il est nécessaire de passer à une résolution bidimensionnelle, plus proche de la réalité et qui permettrait en particulier de lever l'inconsistance de la définition du courant extérieur avec le modèle dans le cas monodimensionnel. Il faut également prévoir une description plus fine de ce courant extérieur. Il ne faut pas perdre de vue qu'un des objectifs est de fournir un modèle suffisamment précis pour envisager une comparaison avec des résultats expérimentaux. A cette fin, il est indispensable de pouvoir prendre en compte plusieurs espèces de particules.

Enfin, si on veut décrire l'extraction d'un faisceau d'ions à partir de ce plasma, le couplage de ces modèles hydrodynamiques avec un modèle cinétique doit être étudié.

Annexe A

Calcul des fréquences de collision

Pour la résolution du modèle totalement ionisé, il est nécessaire de connaître la fréquence de collision ν_{ei} . Elle est calculée à partir de formules trouvées dans [12]; Z est de façon générique le taux d'ionisation, qui vérifie ici Z = 1. On se restreint au cas adiabatique, soit $\gamma = 5/3$. La fréquence de collision entre électrons et ions est donnée par la relation

$$\nu_{ei} = \frac{4\sqrt{2\pi}}{3} \left[\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\right]^2 \frac{Zn_e \ln \Lambda_{ei}}{\sqrt{m_e}(kT_e)^{3/2}} = 3.633\,10^{-6}Zn_e \ln \Lambda_{ei}T_e^{-3/2}$$

où le logarithme coulombien vérifie

$$\ln \Lambda_{ei} = \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{k_{M,ei}^2}{k_{D,ei}^2} \right),$$

avec

$$k_{D,ei}^2 = 2.0998 \, 10^{-4} (1 + \frac{Z}{2}) \frac{n_e}{T_e}$$

 et

$$k_{M,ei} = \min[1.1969 \, 10^5 T_e, 9.5117 \, 10^7 \sqrt{T_e}]$$

De façon simplifiée,

$$\nu_{ei} = a_{ei} n_e T_e^{-3/2}, \tag{A.1}$$

avec

$$a_{ei} = 3.633 \, 10^{-6} \ln \Lambda_{ei}.$$

Annexe B

Traitement de conditions limites absorbantes

Nous proposons ici un moyen de prendre en compte des conditions limites absorbantes. La définition de ces conditions est basée sur une méthode de différences finies issue directement de la méthode des caractéristiques [45]. Nous proposons ici une façon plus simple d'interpréter cette méthode, qui nous a été particulièrement utile lors d'études préliminaires que nous n'avons fait qu'évoquer dans ce document (page 165). Il s'agissait alors d'utiliser une méthode de caractéristiques pour résoudre le système conservatif en énergie (5.40).

Nous cherchons $\mathcal{U}(x,t)$ solution sur $[a,b] \times \mathbb{R}$ d'un système non linéaire écrit sous forme non conservative

$$\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + A(\mathcal{U})\frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} + \mathbf{C} = \mathbf{0}$$
(B.1)

où \mathbf{C} est un terme source. La frontière absorbante est située en x = b. On note λ_i et \mathbf{l}_i les valeurs propres et les vecteurs propres à gauche associés à la matrice A. En "multipliant" (B.1) par \mathbf{l}_i , on obtient le système caractéristique

$$\mathbf{l}_i \cdot \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \lambda_i \mathbf{l}_i \cdot \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} + \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{C} = 0.$$
(B.2)

Si on définit V par

$$dV_i = \mathbf{l}_i \cdot d\mathcal{U} + \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{C} dt,$$

(B.2) devient

$$\frac{\partial V_i}{\partial t} + \lambda_i \frac{\partial V_i}{\partial x} = 0$$

Ces équations définissent des ondes d'amplitude V_i se propageant à la vitesse λ_i . La condition de paroi absorbante consiste à supposer que l'amplitude des ondes entrantes en x = b, définies par $\lambda_i < 0$ est constante en temps, ce qui revient à écrire

$$\left. \frac{\partial V_i}{\partial t} \right|_{x=b} = 0 \text{ pour } \lambda_i < 0$$

Sur la variable \mathcal{U} , c'est équivalent à

$$\mathbf{l}_i \cdot \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{C} = 0.$$

Nous pouvons donc écrire la condition limite en x = b comme ceci :

$$\mathbf{l}_{i} \cdot \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \mathcal{L}_{i} + \mathbf{l}_{i} \cdot \mathbf{C} = 0$$
(B.3)

avec

$$\mathcal{L}_{i} = \begin{cases} \lambda_{i} \mathbf{l}_{i} \cdot \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} \text{ pour } \lambda_{i} > 0, \text{ caractéristiques sortantes} \\ 0 \text{ pour } \lambda_{i} < 0, \text{ caractéristiques entrantes.} \end{cases}$$

Dans le cas où toutes les ondes sont sortantes, on retrouve bien pour la condition limite l'expression générale du système caractéristique (B.1).

En terme d'application, regardons ce que cela implique sur le système d'Euler, avec $\mathbf{U} = (\rho, \rho u, W)^t$, $\mathcal{U} = (\rho, u, p)^t$ et $\mathbf{C} = \mathbf{0}$. Soit l'entier K tel que $b = (K + 1)\Delta x$. On cherche à calculer \mathbf{U}_{K+1}^{n+1} en fonction de \mathbf{U}_{K+1}^n . L'égalité (B.3) s'écrit

$$\frac{\partial p}{\partial t} - \rho c \frac{\partial u}{\partial t} + \mathcal{L}_1 = 0$$
$$\frac{\partial p}{\partial t} - c^2 \frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathcal{L}_2 = 0$$
$$\frac{\partial p}{\partial t} + \rho c \frac{\partial u}{\partial t} + \mathcal{L}_3 = 0$$

où les \mathcal{L}_i sont donnés par

$$\mathcal{L}_{1} = \lambda_{1} \left(\frac{\partial p}{\partial x} - \rho c \frac{\partial u}{\partial x} \right) \text{ si } \lambda_{1} \ge 0,$$

$$\mathcal{L}_{2} = \lambda_{2} \left(\frac{\partial p}{\partial x} - c^{2} \frac{\partial \rho}{\partial x} \right) \text{ si } \lambda_{2} \ge 0,$$

$$\mathcal{L}_{3} = \lambda_{3} \left(\frac{\partial p}{\partial x} + \rho c \frac{\partial u}{\partial x} \right) \text{ si } \lambda_{3} \ge 0.$$

On calcule une approximation de \mathcal{L}_i au temps $n\Delta t$ en approchant de manière générale $\frac{\partial a}{\partial x} \operatorname{par} \frac{a_{K+1}^n - a_K^n}{\Delta x}$. Cela permet de calculer $\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t}\Big|_{K+1}$:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \rho}{\partial t} \right|_{K+1} &= \frac{-\mathcal{L}_1^n + 2\mathcal{L}_2^n - \mathcal{L}_3^n}{2c^2} \\ \left. \frac{\partial u}{\partial t} \right|_{K+1} &= \frac{1}{2\rho c} (\mathcal{L}_1^n - \mathcal{L}_3^n) \\ \left. \frac{\partial p}{\partial t} \right|_{K+1} &= \frac{-1}{2} (\mathcal{L}_1^n + \mathcal{L}_3^n) \end{aligned}$$

En exprimant $\left. \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right|_{K+1}$ en fonction de $\left. \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} \right|_{K+1}$, on obtient

$$\mathbf{U}_{K+1}^{n+1} = \mathbf{U}_{K+1}^n + \left. \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} \right|_{K+1}$$

Remarquons que dans le cadre où nous avons principalement utilisé cette méthode, il s'agissait de déterminer des conditions limites pour le système (5.40) (i.e. $\alpha \neq 0$). Nous avons choisi de ne pas illustrer cette méthode sur ce système là à cause de la forme beaucoup plus compliquée que prennent alors les équations caractéristiques.

Annexe C

Couplage de deux systèmes hyperboliques

C.1 Introduction

Dans cette annexe, nous établissons des résultats généraux liés au couplage entre deux systèmes. Nous regarderons ensuite comment ces résultats se traduisent pour la résolution du modèle totalement ionisé.

Nous considérons les deux systèmes hyperboliques non linéaires

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}_G(\mathbf{u}) = 0 \quad , \ x < 0, \ t > 0 \tag{C.1}$$

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}_D(\mathbf{u}) = 0 \quad , \ x > 0, \ t > 0 \tag{C.2}$$

que l'on veut coupler en x = 0. Cela signifie qu'il faut assurer une certaine continuité de **u** à préciser en x = 0. Par exemple, on peut vouloir résoudre

$$\begin{pmatrix}
\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}_G(\mathbf{u}) = 0 , x < 0, t > 0 \\
\mathbf{u}(0_-, t) \in \mathcal{F}(\mathbf{u}(0_+, t)) , t > 0 \\
\mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_0(x) , x < 0
\end{pmatrix}$$

 et

$$\begin{cases} \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{f}_D(\mathbf{u}) = 0 , \ x > 0, \ t > 0 \\ \mathbf{u}(0_+, t) \in \mathcal{F}(\mathbf{u}(0_-, t)), \ t > 0 \\ \mathbf{u}(x, 0) = \mathbf{u}_0(x), \ x > 0, \end{cases}$$

où $\mathcal{F}(\mathbf{h})$ désigne un ensemble d'états admissibles que l'on peut relier à \mathbf{h} .

Contrairement à ce qui est fait dans le Chapitre 6, l'inconnue est calculée en $x_{j+1/2} = (j+1/2)\Delta x$ et le flux en x_j . On note alors $\mathbf{u}_{j+1/2}^n$ une approximation de $\mathbf{u}(x_{j+1/2}, n\Delta t)$. On utilise les schémas numériques

$$\frac{1}{\Delta t} \left(\mathbf{u}_{j-1/2}^{n+1} - \mathbf{u}_{j-1/2}^{n} \right) + \frac{1}{\Delta x} \left(\mathbf{g}_{G,j}^{n} - \mathbf{g}_{G,j-1}^{n} \right) = 0 \quad , \quad j \le 0$$
(C.3)

$$\frac{1}{\Delta t} \left(\mathbf{u}_{j+1/2}^{n+1} - \mathbf{u}_{j+1/2}^{n} \right) + \frac{1}{\Delta x} \left(\mathbf{g}_{D,j+1}^{n} - \mathbf{g}_{D,j}^{n} \right) = 0 \quad , \ j \ge 0$$
(C.4)

où $\mathbf{g}_{\alpha,j} = \mathbf{g}_{\alpha}(\mathbf{u}_{j-1/2}, \mathbf{u}_{j+1/2})$ pour des flux numériques \mathbf{g}_{α} à 3 points vérifiant les conditions de consistance habituelles

$$\mathbf{g}_{\alpha}(\mathbf{u},\mathbf{u}) = \mathbf{f}_{\alpha}(\mathbf{u}).$$

Remarquons que pour j = 0, $g_{G,j}^n$ fait intervenir des valeurs de $\mathbf{u}_{i+1/2}^n$, comme si elles correspondaient à une approximation de $\mathbf{u}(x,t_n)$ pour x < 0. On ne tient donc pas compte du fait que $\mathbf{u}_{i+1/2}^n$ correspond à une approximation de la solution pour x > 0. Il en va de même pour $\mathbf{g}_{D,0}^n$.

Avant d'aller plus loin sur les systèmes hyperboliques, nous allons établir un résultat qui n'a de sens que dans le cas scalaire.

C.2 Un résultat scalaire

Nous gardons les mêmes notations que dans la section précédente, en remplaçant de manière générique les vecteurs \mathbf{h} par des scalaires h. Nous pouvons alors énoncer la proposition suivante :

Proposition 17

Si les deux schémas sont VTD (variation totale décroissante), alors le schéma global est également VTD.

Rappelons qu'un schéma numérique est dit VTD si

$$\sum_{j} (u_j^{n+1} - u_j^{n+1}) \le \sum_{j} (u_j^n - u_j^n) \text{ pour tout } n,$$

ce qui présente l'avantage de prévenir l'apparition d'oscillations. **Preuve.** Ecrivons les schémas sous forme incrémentale [19] :

$$\begin{aligned} u_{j-1/2}^{n+1} &= u_{j-1/2}^n - C_{G,j-1/2}^n \Delta u_{j-1}^n + D_{G,j-1/2}^n \Delta u_j^n \quad , \ j \le 0 \\ u_{j+1/2}^{n+1} &= u_{j+1/2}^n - C_{D,j+1/2}^n \Delta u_j^n + D_{D,j+1/2}^n \Delta u_{j+1}^n \quad , \ j \ge 0 \end{aligned}$$

оù

$$\Delta u_j = u_{j+1/2} - u_{j-1/2}.$$

Ils sont VTD si

$$\begin{array}{l} C^n_{G,j-1/2} \geq 0, \ D^n_{G,j-1/2} \geq 0, \ C^n_{G,j-1/2} + D^n_{G,j-1/2} \leq 1 & , \ j \leq 0 \\ C^n_{D,j+1/2} \geq 0, \ D^n_{D,j+1/2} \geq 0, \ C^n_{D,j+1/2} + D^n_{D,j+1/2} \leq 1 & , \ j \geq 0 \end{array}$$

Dans le cas d'un schéma à trois points, cette condition est nécessaire et suffisante. Il est alors évident que le schéma global est VTD : il suffit d'effectuer la démonstration habituelle en ne distinguant pas les indices G et D.

C.3 Un résultat de type Lax-Wendroff

Nous revenons maintenant au cas de systèmes hyperboliques. Il s'agit maintenant de voir quel problème couplé on résout effectivement en utilisant (C.3) et (C.4). Les résultats qui suivent ainsi que les méthodes utilisées ont été adaptées de [19].

Nous allons ici supposer que $(\mathbf{u}_{i+1/2}^n)$ converge dans un sens convenable vers une fonction \mathbf{u} et nous allons chercher à caractériser \mathbf{u} . De manière classique, on associe à la suite $(\mathbf{u}_{i+1/2}^n)$ une fonction étagée \mathbf{u}_{Δ} définie par

$$\mathbf{u}_{\Delta}(x,t) = \mathbf{u}_{j+1/2}^n$$
, $x_j < x < x_{j+1}, t_n \le t \le t_{n+1}$

On définit également

$$\begin{cases} \mathbf{u}_{\Delta}(0_{-},t) = \mathbf{u}_{-1/2}^n \\ \mathbf{u}_{\Delta}(0_{+},t) = \mathbf{u}_{1/2}^n \end{cases}, t_n \le t \le t_{n+1}.$$

Avant d'énoncer le théorème, rappelons les définitions suivantes :

Definition 18

On définit la variation totale d'une fonction $h \in L^1_{loc}(\Omega)$ par

$$TV(h) = \sup\left\{\int_{\Omega} h \, div \chi dx \, , \, \chi \in C_0^1(\Omega), \|\chi\|_{L^{\infty}(\Omega)} \le 1\right\} \, .$$

Definition 19

On dit que $h \in L^1_{loc}(\Omega)$ est à variation bornée dans Ω si $TV(h) < +\infty$ et on définit

$$BV(\Omega) = \left\{ h \in L^1_{loc}(\Omega) ; TV(h) < +\infty \right\}.$$

Théorème 20

On suppose que

$$\mathbf{u}_{1/2}^{0} = \frac{1}{\Delta x} \int_{x_j}^{x_{j+1}} \mathbf{u}_0(x)$$

et qu'il existe une fonction $\mathbf{u} \in L^{\infty}(\mathbb{R} \times [0, +\infty[) \cap L^{1}_{loc}(\mathbb{R} \times [0, +\infty[) \text{ avec } \mathbf{u}(., t) \in BV(\mathbb{R})$ pour tout t, telle que pour $\lambda = \Delta t / \Delta x$ fixé,

$$\|\mathbf{u}_{\Delta}\|_{L^{\infty}(\mathbb{R}\times[0,+\infty[)}\leq c,$$

$$\mathbf{u}_{\Delta} \to \mathbf{u} \ dans \ L^{1}_{loc}(\mathbb{R} \times [0, +\infty[) \ et \ presque \ partout, \mathbf{u}_{\Delta}(0_{\pm}, .) \to \mathbf{u}(0_{\pm}, .) \ dans \ L^{1}_{loc}([0, +\infty[) \ et \ presque \ partout.$$
(C.5)

Alors, la fonction \mathbf{u} est solution au sens faible de (C.1), (C.2) avec la condition initiale

$$\mathbf{u}(x,0) = \mathbf{u}_0(x) \tag{C.6}$$

et la condition de couplage formelle

$$(\mathbf{g}_G - \mathbf{g}_D)(\mathbf{u}(0_-, t), \mathbf{u}(0_+, t)) = \mathbf{f}_G(\mathbf{u}(0_-, t)) - \mathbf{f}_D(\mathbf{u}(0_+, t)).$$
(C.7)

Preuve. Elle est analogue à la démonstration du théorème de Lax-Wendroff. Soit χ une fonction test de C_0^1 ($\mathbb{R} \times [0, +\infty[$), on peut écrire

$$\sum_{n\geq 0} \left(\mathbf{u}_{j+1/2}^{n+1} - \mathbf{u}_{j+1/2}^{n} \right) \cdot \chi_{j+1/2}^{n} = -\sum_{n\geq 0} \mathbf{u}_{j+1/2}^{n} \cdot \left(\chi_{j+1/2}^{n} - \chi_{j+1/2}^{n-1} \right) - \mathbf{u}_{j+1/2}^{0} \cdot \chi_{j+1/2}^{-1}$$

 et

$$\sum_{j \le 0} \left(\mathbf{g}_{G,j}^n - \mathbf{g}_{G,j-1}^n \right) \cdot \chi_{j-1/2}^n = -\sum_{j \le -1} \mathbf{g}_{G,j}^n \cdot \left(\chi_{j+1/2}^n - \chi_{j-1/2}^n \right) + \mathbf{g}_{G,0}^n \cdot \chi_{-1/2}^n$$
$$\sum_{j \ge 0} \left(\mathbf{g}_{D,j+1}^n - \mathbf{g}_{D,j}^n \right) \cdot \chi_{j+1/2}^n = -\sum_{j \ge 1} \mathbf{g}_{D,j}^n \cdot \left(\chi_{j+1/2}^n - \chi_{j-1/2}^n \right) - \mathbf{g}_{D,0}^n \cdot \chi_{1/2}^n$$

On obtient ainsi, à partir de (C.3),

$$-\Delta x \sum_{n\geq 0} \sum_{j\leq 0} \mathbf{u}_{j-1/2}^{n} \cdot \left(\chi_{j-1/2}^{n} - \chi_{j-1/2}^{n-1}\right) - \Delta x \sum_{j\leq 0} \mathbf{u}_{j-1/2}^{0} \cdot \chi_{j-1/2}^{-1}$$
$$-\Delta t \sum_{n\geq 0} \sum_{j\leq -1} \mathbf{g}_{G,j}^{n} \cdot \left(\chi_{j+1/2}^{n} - \chi_{j-1/2}^{n}\right) + \Delta t \mathbf{g}_{G,0}^{n} \cdot \chi_{-1/2}^{n} = 0$$

et à partir de (C.4)

$$-\Delta x \sum_{n\geq 0} \sum_{j\geq 0} \mathbf{u}_{j+1/2}^n \cdot \left(\chi_{j+1/2}^n - \chi_{j+1/2}^{n-1}\right) - \Delta x \sum_{j\geq 0} \mathbf{u}_{j+1/2}^0 \cdot \chi_{j+1/2}^{-1}$$
$$-\Delta t \sum_{n\geq 0} \sum_{j\geq 1} \mathbf{g}_{D,j}^n \cdot \left(\chi_{j+1/2}^n - \chi_{j-1/2}^n\right) - \Delta t \mathbf{g}_{D,0}^n \cdot \chi_{1/2}^n = 0$$

d'où

$$\begin{split} \Delta t \sum_{n \ge 0} \left\{ \Delta x \sum_{j \in \mathbf{Z}} \mathbf{u}_{j+1/2}^{n} \cdot \frac{\chi_{j+1/2}^{n} - \chi_{j+1/2}^{n-1}}{\Delta t} + \Delta x \sum_{j \le -1} \mathbf{g}_{G,j}^{n} \cdot \frac{\chi_{j+1/2}^{n} - \chi_{j-1/2}^{n}}{\Delta x} + \right. \\ \left. + \Delta x \sum_{j \ge 1} \mathbf{g}_{D,j}^{n} \cdot \frac{\chi_{j+1/2}^{n} - \chi_{j-1/2}^{n}}{\Delta x} + \mathbf{g}_{D,0}^{n} \cdot \chi_{1/2}^{n} - \mathbf{g}_{G,0}^{n} \cdot \chi_{-1/2}^{n} \right\} + \\ \left. + \Delta x \sum_{j \in \mathbf{Z}} \mathbf{u}_{j+1/2}^{0} \cdot \chi_{j+1/2}^{-1} = 0. \end{split}$$

Comme

$$\mathbf{g}_{D,0}^{n} \cdot \chi_{1/2}^{n} - \mathbf{g}_{G,0}^{n} \cdot \chi_{-1/2}^{n} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{g}_{D,0}^{n} + \mathbf{g}_{G,0}^{n} \right) \cdot \left(\chi_{1/2}^{n} - \chi_{-1/2}^{n} \right) + \frac{1}{2} \left(\mathbf{g}_{D,0}^{n} - \mathbf{g}_{G,0}^{n} \right) \cdot \left(\chi_{1/2}^{n} + \chi_{-1/2}^{n} \right),$$

on obtient finalement que

$$\begin{split} &\Delta t \sum_{n \ge 0} \left\{ \Delta x \sum_{j \in \mathbf{Z}} \mathbf{u}_{j+1/2}^{n} \cdot \frac{\chi_{j+1/2}^{n} - \chi_{j+1/2}^{n-1}}{\Delta t} + \Delta x \sum_{j \le -1} \mathbf{g}_{G,j}^{n} \cdot \frac{\chi_{j+1/2}^{n} - \chi_{j-1/2}^{n}}{\Delta x} + \\ &+ \frac{\Delta x}{2} \mathbf{g}_{G,0}^{n} \cdot \frac{\chi_{1/2}^{n} - \chi_{-1/2}^{n}}{\Delta x} + \Delta x \sum_{j \ge 1} \mathbf{g}_{D,j}^{n} \cdot \frac{\chi_{j+1/2}^{n} - \chi_{j-1/2}^{n}}{\Delta x} + \\ &+ \frac{\Delta x}{2} \mathbf{g}_{D,0}^{n} \cdot \frac{\chi_{1/2}^{n} - \chi_{-1/2}^{n}}{\Delta x} + \frac{1}{2} \left(\mathbf{g}_{D,0}^{n} - \mathbf{g}_{G,0}^{n} \right) \cdot \left(\chi_{1/2}^{n} + \chi_{-1/2}^{n} \right) \right\} + \\ &+ \Delta x \sum_{j \in \mathbf{Z}} \mathbf{u}_{j+1/2}^{0} \cdot \chi_{j+1/2}^{-1} = 0. \end{split}$$

On définit alors la fonction \mathbf{g}_{Δ} dans ${\rm I\!R}\times [0,+\infty[$ par

$$\mathbf{g}_{\Delta}(x,t) = \begin{cases} \mathbf{g}_{G,j}^{n} , \ x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2}, j \leq -1 \\ \mathbf{g}_{G,0}^{n} , \ x_{-1/2} < x < 0 \\ \mathbf{g}_{D,0}^{n} , \ 0 < x < x_{1/2} \\ \mathbf{g}_{D,j}^{n} , \ x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2}, j \geq 1 \end{cases}$$

Alors la fonction précédente s'écrit

$$\begin{split} &\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} \left\{ \mathbf{u}_{\Delta}(x,t) \cdot \frac{1}{\Delta t} \left(\chi(x,t) - \chi(x,t-\Delta t) \right) + \right. \\ &\left. + \mathbf{g}_{\Delta}(x,t) \cdot \frac{1}{\Delta x} \left(\chi(x+\frac{\Delta x}{2},t) - \chi(x-\frac{\Delta x}{2},t) \right) \right\} dx dt + \\ &\left. + \int_0^\infty \frac{1}{2} \left(\mathbf{g}_{\Delta}(0_+,t) - \mathbf{g}_{\Delta}(0_-,t) \right) \cdot \left(\chi_{\Delta}(0_+,t) + \chi_{\Delta}(0_-,t) \right) dt + \right. \\ &\left. + \int_{\mathbb{R}} \mathbf{u}_0(x) \cdot \chi_{\Delta}(x,-\Delta t) dx = 0 \end{split}$$

On peut maintenant passer à la limite dans cette expression. En utilisant la méthode de démonstration du théorème de Lax-Wendroff, on obtient que

$$\int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} \mathbf{u}_\Delta(x,t) \cdot \frac{1}{\Delta t} \left(\chi(x,t) - \chi(x,t-\Delta t) \right) dx dt \to \int_0^\infty \int_{\mathbb{R}} \mathbf{u} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial t} dx dt$$

et que

$$\int_0^\infty \int_{-\infty}^0 \mathbf{g}_\Delta(x,t) \cdot \frac{1}{\Delta x} \left(\chi(x + \frac{\Delta x}{2}, t) - \chi(x - \frac{\Delta x}{2}, t) \right) dx dt \to \int_0^\infty \int_{-\infty}^0 \mathbf{f}_G(\mathbf{u}) \cdot \frac{\partial \chi}{\partial t} dx dt$$

d'une part, et

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \mathbf{g}_\Delta(x,t) \cdot \frac{1}{\Delta x} \left(\chi(x + \frac{\Delta x}{2}, t) - \chi(x - \frac{\Delta x}{2}, t) \right) dx dt \to \int_0^\infty \int_0^\infty \mathbf{f}_G(\mathbf{u}) \cdot \frac{\partial \chi}{\partial t} dx dt$$

d'autre part. Par ailleurs, on a

$$\int_{\mathbb{R}} \mathbf{u}_0(x) \cdot \chi_\Delta(x, -\Delta t) dx \to \int_{\mathbb{R}} \mathbf{u}_0 \cdot \chi_\Delta(., 0) dx.$$

Il reste à examiner la convergence de

$$\int_0^\infty \frac{1}{2} \mathbf{g}_\Delta(0_\pm, t) . \left(\chi_\Delta(0_+, t) + \chi_\Delta(0_-, t) \right) dt.$$

On a

$$\mathbf{g}_{\Delta}(0_+,t) = \mathbf{g}_D(\mathbf{u}_{\Delta}(0_-,t),\mathbf{u}_{\Delta}(0_+,t)),\\ \mathbf{g}_{\Delta}(0_-,t) = \mathbf{g}_G(\mathbf{u}_{\Delta}(0_-,t),\mathbf{u}_{\Delta}(0_+,t)).$$

En utilisant l'hypothèse (C.5) du théorème, on obtient que

$$\int_0^\infty \frac{1}{2} \mathbf{g}_{\Delta}(0_+, t) \cdot (\chi_{\Delta}(0_+, t) + \chi_{\Delta}(0_-, t)) \, dt \to \int_0^\infty \frac{1}{2} \mathbf{g}_D(\mathbf{u}(0_-, t), \mathbf{u}(0_+, t)) \chi_{\Delta}(0, t) \, dt$$

 et

$$\int_0^\infty \frac{1}{2} \mathbf{g}_\Delta(0_-, t) \cdot (\chi_\Delta(0_+, t) + \chi_\Delta(0_-, t)) \, dt \to \int_0^\infty \frac{1}{2} \mathbf{g}_G(\mathbf{u}(0_-, t), \mathbf{u}(0_+, t)) \chi_\Delta(0, t) \, dt.$$

Il en résulte que la fonction **u** vérifie pour toute fonction $\chi \in C_0^1 (\mathbb{R} \times [0, +\infty[)$

$$\int_{0}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{0} \left(\mathbf{u} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial t} + \mathbf{f}_{G}(\mathbf{u}) \cdot \frac{\partial \chi}{\partial x} \right) dx + \int_{0}^{\infty} \left(\mathbf{u} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial t} + \mathbf{f}_{D}(\mathbf{u}) \cdot \frac{\partial \chi}{\partial x} \right) dx + \left(\mathbf{g}_{D} - \mathbf{g}_{G} \right) (\mathbf{u}(0_{-}, t), \mathbf{u}(0_{+}, t)) \cdot \chi(0, t) \right\} dt + \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{u}_{0} \cdot \chi(., 0) dx = 0.$$
(C.8)

La suite de la démonstration est formelle, dans la mesure où elle fait appel à des formules de Green dont les conditions de validité sont à préciser.

En prenant $\chi \in C_0^1(] - \infty, 0] \times [0, +\infty[)$ (resp. $\chi \in C_0^1([0, +\infty] \times [0, +\infty[))$, on obtient immédiatement que la fonction u est solution de (C.1) (resp. (C.2)), avec la condition initiale (C.6). On en déduit que pour toute fonction test $\chi \in C_0^1(\mathbb{R} \times [0, +\infty[)$

$$\int_0^\infty \left\{ \int_{-\infty}^0 \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_G(\mathbf{u})}{\partial x} \right) \cdot \chi dx + \int_0^\infty \left(\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{f}_D(\mathbf{u})}{\partial x} \right) \cdot \chi dx \right\} dt = 0,$$

et, par utilisation de la formule de Green,

$$\int_{0}^{\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{0} \left(\mathbf{u} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial t} + \mathbf{f}_{L}(\mathbf{u}) \cdot \frac{\partial \chi}{\partial x} \right) dx - \mathbf{f}_{G}(\mathbf{u}(0_{-},t)) \cdot \chi(0,t) + \int_{0}^{\infty} \left(\mathbf{u} \cdot \frac{\partial \chi}{\partial t} + \mathbf{f}_{D}(u) \cdot \frac{\partial \chi}{\partial x} \right) dx + \mathbf{f}_{D}(\mathbf{u}(0_{+},t)) \cdot \chi(0,t) \right\} dt + \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{u}_{0} \cdot \chi(.,0) dx = 0.$$
(C.9)

En comparant (C.8) et (C.9), on obtient que

$$\int_0^\infty (\mathbf{g}_G - \mathbf{g}_D)(\mathbf{u}(0_-, t), \mathbf{u}(0_+, t)) \cdot \chi(0, t) dt = \int_0^\infty \left(\mathbf{f}_G(\mathbf{u}(0_-, t)) - \mathbf{f}_D(\mathbf{u}(0_+, t)) \right) \cdot \chi(0, t) dt,$$

d'où (C.7). Réciproquement, (C.7) et (C.9) impliquent (C.8).

Ainsi, la fonction **u** vérifie (C.8) si et seulement si elle est solution de (C.1) et (C.2) avec la condition initiale (C.6) et la condition de couplage (C.7).

C.4 Application au schéma HLLE

On note de manière générique $\mathbf{h}_{\pm} = \mathbf{h}(0_{\pm}, t)$.

Regardons ce que donne la relation de couplage appliquée à la résolution du modèle totalement ionisé. On reprend les notations du Chapitre 6 et on définit

$$b^{+} = b_{G}^{+} = b_{D}^{+} = \max(0, u_{-} + c_{-}, u_{+} + c_{+}),$$

$$b_{D}^{-} = \min(0, u_{-} - c_{-}, u_{+} - c_{+}),$$

$$b_{G}^{-} = \min(0, u_{-} - c_{-}, u_{+} - c_{+}, u_{-} - \frac{\alpha}{\rho_{-}}).$$

Les flux numériques s'écrivent

$$g_D(\mathbf{U}_-, \mathbf{U}_+) = \frac{b^+ \mathbf{f}_D(\mathbf{U}_-) - b_D^- \mathbf{f}_D(\mathbf{U}_+)}{b^+ - b_D^-} + \frac{b^+ b_D^- (\mathbf{U}_+ - \mathbf{U}_-)}{b^+ - b_D^-}$$

 et

$$g_G(\mathbf{U}_-,\mathbf{U}_+) = \frac{b^+ \mathbf{f}_G(\mathbf{U}_-) - b_G^- \mathbf{f}_G(\mathbf{U}_+)}{b^+ - b_G^-} + \frac{b^+ b_G^- (\mathbf{U}_+ - \mathbf{U}_-)}{b^+ - b_G^-}.$$

Comme nous l'avons fait dans la Section (6.7), nous supposons que

$$u_- - c_- < u_- - \frac{\alpha}{\rho_-}$$

de sorte que

$$b_G^- = b_D^- \stackrel{def}{=} b^-.$$

La relation de couplage (C.7) s'écrit alors

$$\frac{b^{+}\mathbf{f}_{D}(\mathbf{U}_{-})-b^{-}\mathbf{f}_{D}(\mathbf{U}_{+})}{b^{+}-b^{-}}-\frac{b^{+}\mathbf{f}_{G}(\mathbf{U}_{-})-b^{-}\mathbf{f}_{G}(\mathbf{U}_{+})}{b^{+}-b^{-}}=\mathbf{f}_{D}(\mathbf{U}_{+})-\mathbf{f}_{G}(\mathbf{U}_{-}),$$

soit

$$-b^{-}\mathbf{f}_{G}(\mathbf{U}_{-}) - b^{+}\mathbf{f}_{D}(\mathbf{U}_{+}) = -b^{-}\mathbf{f}_{G}(\mathbf{U}_{+}) - b^{+}\mathbf{f}_{D}(\mathbf{U}_{-}).$$

On suppose maintenant que nous sommes dans la situation illustrée par la Figure (6.13), c'est-à-dire que $b^-b^+ \neq 0$, et on pose $\beta = b^-/b^+$. En désignant par [h] le saut de la variable h et en explicitant les composantes des flux, la relation de couplage devient

$$\begin{cases} [\rho u] = \beta[\rho u] \\ [\rho u^2 + p] = \beta[\rho u^2 + p] \\ [\rho u s] = \beta[(\rho u - \alpha)s] \end{cases}.$$

La première équation implique que $[\rho u] = 0$, et la troisième équation s'écrit donc

$$(1 - \beta)\rho u[s] = -\alpha\beta[s].$$

Si $\alpha\beta \neq (\beta - 1)\rho u$, cette relation implique que

$$[s] = 0.$$

Avec $p = (\rho s)^{\gamma}$, la deuxième équation devient

$$\rho u[u] + s^{\gamma}[\rho^{\gamma}] = 0.$$

Ainsi, si on suppose que la vitesse est continue, la condition de compatibilité s'écrit

$$u(0_+, t) = u(0_-, t),$$

c'est-à-dire que la résolution du problème pour x < 0 fournit la condition aux limites en x = 0 pour le problème pour x > 0 et inversement.

Bibliographie

- [1] R. Abgrall, S. Karni, *Compressible Multifluids*, soumis JCP, 2000.
- [2] P.-E. Bernaudin, Projet IPHI : étude et optimisation de la ligne de transport basse énergie, 1997, rapport de DEA, Université Paris VI.
- [3] C.K. Birdsall, A.B. Langdon, *Plasma Physics via Computer Simulation*, McGraw-Hill, 1985.
- [4] H. Bluhm et al., Progress and Challenges in the Development of Light Ion Beam Drivers for Inertial Fusion Energy, Proceedings of the First International Conference on Inertial Fusion Sciences and Application, Bordeaux 1999, p744.
- [5] B. Bodin, Modélisation et simulation numérique du régime de Child-Langmuir et de l'extraction d'un faisceau d'ions depuis un plasma neutre, Thèse de doctorat de l'Ecole Polytechnique, 1995.
- [6] B. Bodin, Sur la méthode directe implicite, rapport interne CMAP, Ecole Polytechnique, 1993.
- [7] A. Bolotov, A. Kozyrev, and Y. Korolev, A Physical model of the low-current density vacuum arc, IEEE Transaction on Plasma Science, Vol. 23, n°6, 884-891, Décembre 1995.
- [8] G. Bonnaud, *Simulation numériques des plasmas chauds*, cours de DEA de physique des plasmas, Université Paris XI, 1997.
- J.U. Brackbill and D.W. Forslund, An Implicit Method for Electromagnetic Plasma Simulation in Two Dimensions, JCP, 46, 271-308, 1982.
- [10] C. Buet, S. Cordier, P.A. Raviart, Modèles cinétiques multi-espèces pour l'ionisation, Rapport interne, CEA/DIF/DCSA/SNEC/36/00/DO, avril 2000.
- [11] A. Caruso and A. Cavaliere, The Structure of the Collisionless Plasma-Sheath Transition, Il Nuovo Cimento, VolXXVI, N. 6, 1962.
- [12] A. Decoster, Modeling of Collisions, Gauthier-Villars & North-Holland, pp 1-137, 1998.
- [13] F. Doneddu, Modélisation des Gaines Electrostatiques et Erosion de Plasma, Quatrième Ecole d'Eté du GdR SPARCH, 1997.
- [14] H. W. Drawin, P. Felenbok, Data for Plasmas in Local Thermodynamic Equilibrium, Gauthiers-Villars, 1965.
- [15] C. Faure, Demande de brevet n°86 10172 pour "source d'ions à haut rendement à structure planaire", brevatome, 1986.
- [16] C. Faure, Tubes scellés générateurs impulsionnels de neutrons, ACTA ELECTRO-NICA, Vol. 13, n°4, 317-364, 1970.
- [17] X. Fleury, Modélisation et Simulation Numérique de la neutralisation de charge d'espace d'un faisceau de protons, Thèse de doctorat de l'Ecole Polytechnique, 2000.
- [18] A. T. Forrester, Large Ion Beams Fundamentals of Generation and Propagation, Wiley Interscience, 1988.
- [19] E. Godlewski, P.A. Raviart, Hyperbolic Systems of Conservation Laws, Mathématiques et Applications, Ellipse, Paris, 1991.
- [20] E. Godlewski, P.A. Raviart, Numerical Approximation of Hyperbolic Systems of Conservation Laws, Springer Verlag, 1996.
- [21] R. J. Goldston, P. H. Rutherford, Introduction to Plasma Physics, Institute of Physics Publishing, 1995.
- [22] A. Harten, P.D. Lax, B. Van Leer, On upstream differencing and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws, SIAM Review, 25, n°1, janvier 1983.
- [23] R.W. Hockney, J.W. Eastwood, Computer Simulation Using Particles, McGraw-Hill, 1981.
- [24] R. Illner and S. Rjasanow, Numerical solution of the Boltzmann equation by random discrete velocity models, Eur. J. Mech., B/Fluids, 13, n°2, 197-210, 1994.
- [25] E. Isaacson and B. Temple, Nonlinear Resonance in Systems of Conservation Laws, SIAM I, Appl. Math., 52, n°5, 1260-1278, octobre 1992.
- [26] S. Jaouen, J. Segré, P.A. Raviart, Modèle fluide d'extraction d'ions. Rapport de stage, SPPE, 1998.
- [27] M. Lamp et al. Quasineutral Particle Simulation of Magnetized Plasma Discharges : General Formalism and Application to ECR Discharges, NRL Memorandum report 6709-97-7960, 1997.
- [28] I. Langmuir, Scattering of Electrons in Ionized gases, Phys. Rev. 26, 585, 1925.
- [29] C. Lejeune, Extraction of high-intensity ions beams from plasma sources : theoritical and experimental aspects, Applied Charged Particle Optics, Part C, pp 207-291; (A. septier ed.), Academic press, 1983.
- [30] K. C. Le Thanh, Modélisation à deux températures et trois espèces du plasma associé à la source d'ions, Rapport interne à paraître.
- [31] R.J. Leveque; Numerical Methods for Conservation Laws, Lectures in Mathematics ETF Zurich, Birkaüser Verlag (1992).
- [32] R.J. Mason, Implicit Moment Particle Simulation of Plasmas, JCP, 41, 233-244, 1981.
- [33] R.J. Mason, An Electromagnetic Field Algorithm for 2D Implicit Plasma Simulation, JCP, 71, 429-473, 1986.
- [34] H.C. Miller, Vacuum arc anode phenomena, IEEE Transaction on Plasma Science, Vol. PS - 5, n°3, 181-196, septembre 1997.

- [35] L. Papon, Approximation paraxiale des équations de Vlasov-Mawell et applications, Thèse de doctorat de l'Université Paris VI, 1993.
- [36] T. Pougeard Dulimbert, P.A Raviart, A. Salères, Modélisation du plasma associé à la source d'ions, Rapport interne, CEA/DIF/DPTA/SPPE N°00-04/DO (2000).
- [37] T. Pougeard Dulimbert, *Résolution Numérique des Equations de la Magnétohydrody*namique Idéale Bidimensionnelle, Rapport de D.E.A, Université Bordeaux I, 1996.
- [38] Rappaz, N. Ben Abdallah, S. Mas-Gallic.
- [39] D. Rap, P. Anglander-Golden, Total Cross Sections for Ionization and Attachment in Gases by Electron Impact, Journal of Chemical Physics, 43, n°5, 1464-1479, 1965.
- [40] P.A. Raviart, Modélisation des Gaines Electrostatiques et Erosion de Plasma, Quatrième Ecole d'Eté du GdR SPARCH, 1997.
- [41] P.A. Raviart, Approximation particulaire des fonctions, Ecole d'Eté EDF-INRIA, 1913.
- [42] J.M. Rax, Introduction à la physique des plasmas, Cours de DEA de physique des plasmas, Paris XI, 1999.
- [43] S.A. Self, Exact Solution of the Collisionless Plasma-Sheath Equation, 6, n°6, 1762-1768, 1963.
- [44] M. Tanaka, M. Ushio, C. Song Wu, One-dimensional analysis of the anode boundary layer in free-burning argon arcs, J. Phys. D, 32, 605-611 (1999).
- [45] K. W. Thompson, Time Dependent Boundary Conditions for Hyperbolic Systems, JCP, 68, 1-24, 1987.
- [46] P. Lascaux, R. Théodor, Analyse numérique matricielle appliquée à l'art de l'ingénieur, Masson, 1986.
- [47] C. Toccoli, Simulation de la Spallation : Analyse et Test des Modèles Nucléaires, Thèse de doctorat de l'Université Paris XI, 2000.
- [48] E. F. Toro, Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics, Springer Verlag, 1997.
- [49] Y. Vasenin, Parameters of plasma layer within the vacuum arc cathode spot, IEEE Transaction on Plasma Science, Vol. 27, n°4, août 1999.
- [50] J.H. Whealton, E.F. Jaeger and J.C. Whitson, Optics of Ion Beams of Arbitrary Perveance Extracted from a Plasma, JCP, 27, 32-41, 1978.
- [51] J.C. Whitson, J. Smith, J.H. Whealton, Calculations Involving Ion Beam Source, JCP, 28, 408-415, 1978.
- [52] J.H. Whealton, Ion Extraction and Optics Arithmetics, Nuclear Instruments and Methods, 189, 55-70, 1981.
- [53] J.H. Whealton, Expeditious Vlasov Solver for Computation of Ion Extraction from a Plasma, JCP, 40, 491-496, 1981.
- [54] J. H. Whealton, R. W. McGaffey, P. S. Meszaros, A Finite 3-D Poisson-Vlasov Algorithm for Ions Extracted from a Plasma, JCP, 63, 20-32, 1986.
- [55] J.H. Whealton et al., Nonlinear beam-dynamics calculations with an illustrative example, Phys. Rev. A, Vol. 45, n°6, 4036-4044, 15 mars 1992.