

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE BATNA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MEMOIRE

Présenté pour obtenir le diplôme de :

Magister en Physique des rayonnements

Plasmas Et Lasers

Par

M^{elle} ZEGHICHI Leyla

THEME

Etude D'une Décharge Electrique par la Méthode De Monte Carlo

Soutenu, le 29 avril 2010, devant le jury :

Prof.	Bouldjedri Abdelhamid	Université de Batna	Président
Prof.	Mokhnache Leïla	Université de Batna	Rapporteur
Prof.	Mimoune Mohammed Souri	Université de Biskra	Examineur
Prof.	Djebabra Mébarek	Université de Batna	Examineur

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE BATNA

FACULTE DES SCIENCES

DEPARTEMENT DE PHYSIQUE

MEMOIRE

Présenté pour obtenir le diplôme de :

Magister en Physique des rayonnements

Plasmas Et Lasers

Par

M^{elle} ZEGHICHI Leyla

THEME

Etude D'une Décharge Electrique par la Méthode De Monte Carlo

Soutenu, le 29 avril 2010, devant le jury :

Prof.	Bouldjedri Abdelhamid	Université de Batna	Président
Prof.	Mokhnache Leïla	Université de Batna	Rapporteur
Prof.	Mimoune Mohammed Souri	Université de Biskra	Examineur
Prof.	Djebabra Mébarek	Université de Batna	Examineur

Table des matières

Liste des figures i

Liste des tableaux ii

Remerciements

Acronymes

Introduction générale

1 Problématique..... 1

2 Objectifs de l'étude..... 2

3 Structure du mémoire 2

Chapitre I : Physique des Décharges Electriques, Processus Fondamentaux

1 Introduction 4

2 Paramètres électriques et physiques 4

2.1 Champ électrique 4

2.2 Fonction de distribution des particules..... 5

2.3 Physique des collisions atomiques dans une décharge électrique 6

3 Processus de production des espèces chargées 8

3.1 Processus primaires 9

3.2 Processus secondaires 11

3.3 Emission du champ 13

4 Décharges électriques dans les gaz pour les petits intervalles 14

4.1 Le premier coefficient de Townsend..... 14

4.2 Le second coefficient de Townsend 16

4.3 Le coefficient de diffusion..... 17

4.4 Le claquage électrique (Condition d'entretien de la décharge électrique) .18

4.5 Loi de Paschen 20

5 Conclusion 21

Bibliographie du Chapitre I 22

Chapitre II : Modèles et méthodes pour l'étude des décharges électriques dans les gaz

1 Introduction	23
2 Modèles physiques.....	23
2.1 Modèle cinétique	23
2.2 Le modèle fluide	25
3 Méthodes numériques.....	28
3.1 Méthode des Eléments Finis.....	28
3.2 Méthode des charges fictives.....	28
4 Méthodes heuristiques.....	29
4.1 Les algorithmes et la programmation génétiques	29
4.2 Les réseaux de neurones.....	30
5 Méthodes probabilistes.....	31
6 Conclusion	31
<i>Bibliographie du Chapitre II.....</i>	<i>32</i>

Chapitre III : La Simulation Monte Carlo (SMC)

1 Introduction	34
2 Eléments de base de la SMC	34
2.1 Historique	34
2.2 Domaines d'application.....	35
2.3 Fondement de la SMC.....	37
2.4 Description de la SMC	37
2.5 Principe mathématique de la SMC.....	38
2.6 Méthodologie d'exécution de la SMC	39
2.7 Mise en œuvre de la SMC	39
3 Génération des variables aléatoires	41
3.1 La technique d'Inversion.....	43
3.2 La technique du rejet	45
4 Résolution de l'équation de poisson par la SMC.....	46
4.1 Discrétisation	46
4.2 Description.....	47
4.3 Organigramme	48
4.4 Résultats	49

5 Conclusion	50
<i>Bibliographie du Chapitre III</i>	51
Chapitre IV : Application de la SMC à la détermination des paramètres physiques d'une décharge électrique	
1 Introduction	53
2 Le modèle	53
2.1 Génération des électrons initiaux	53
2.2 Résolution des équations du mouvement avant la collision	54
2.3 Traitement des collisions	55
3 Application des méthodes de la SMC.....	57
3.1 Simulation à pas constant	57
3.2 Simulation par événements.....	59
3.3 Calcul des paramètres électriques et physique de la décharge	61
4 Analyse et discussion des résultats.....	63
4.1 Effet du nombre d'histoires	63
4.2 Effet de la pression sur le développement de la décharge électrique.....	64
4.3 Effet de la tension	70
4.4 Vérification du critère du claquage pour différentes pressions	71
4.5 Validation	72
5 Conclusion	73
<i>Bibliographie du Chapitre VI</i>	74
Conclusion générale	
1 Travail achevé	75
2 Difficultés rencontrées	76
3 Perspectives envisageables	76
Annexes	
L'expérience du compte de Buffon.....	78
Modélisation à l'aide de la fonction sinus.....	78
Génération des variables aléatoires.....	79
Elaboration des lois d'échantillonnage	79
Organigramme de la Simulation Monte Carlo (version à pas constant)	80

Programme de la SIMulation du Comportement des Electrons dans une Décharge Electrique (version à pas variable)	81
Abstract	89

Liste des figures

<i>Figure I.1</i> : Schéma représentatif de l'intervalle inter- électrodes.....	14
<i>Figure I.2</i> : Variation du courant en fonction de la tension.....	15
<i>Figure I.3</i> : Croissance du streamer positif [JMM 53]	19
<i>Figure I.4</i> : Croissance du streamer négatif [JMM 53]	20
<i>Figure II.1</i> : Distribution spatiale du potentiel et du champ électrique en régime stationnaire dans l'argon.....	27
<i>Figure II.2</i> : Distribution spatiale des densités ionique et électronique en régime stationnaire dans l'argon.....	27
<i>Figure II.3</i> : Champ électrique suivant l'axe Z avec et sans charge d'espace.....	28
<i>Figure II.4</i> : Variation de E en fonction de la distance inter-électrodes pour les différents diélectriques	29
<i>Figure II.5</i> : Variation de la tension du claquage électrique en fonction de la distance inter-électrodes.	30
<i>Figure III.1</i> : Fondement de la SMC	37
<i>Figure III.2</i> : But de la SMC	38
<i>Figure III.3</i> : Schéma représentatif des différentes étapes dans une SMC.....	39
<i>Figure III.4</i> : Simulation à pas constant	40
<i>Figure III.5</i> : Simulation à pas variable.....	41
<i>Figure III.6</i> : Illustration de la technique d'inversion	43
<i>Figure III.7</i> : Illustration de la technique du rejet	45
<i>Figure III.8</i> : Organigramme de résolution de l'équation de poisson.....	48
<i>Figure III.9</i> : Variation du potentiel en fonction du nombre de chemins.....	49
<i>Figure IV.1</i> : Variation en fonction du nombre d'histoires (pas constant).....	63
<i>Figure IV.2</i> : Variation en fonction du nombre d'histoires (pas variable).....	64
<i>Figure IV.3</i> : Variation temporelle du taux d'ionisation ($p=1\text{ torr}$, $V=263.7\text{ v}$)	65
<i>Figure IV.4</i> : Variation temporelle du taux d'attachement ($p=1\text{ torr}$, $V=263.7\text{ v}$).....	65
<i>Figure IV.5</i> : Variation temporelle de la vitesse de dérive ($p=1\text{ torr}$, $V=263.7\text{ v}$).....	66
<i>Figure IV.6</i> : Variation temporelle de l'énergie moyenne ($p=1\text{ torr}$, $V=263.7\text{ v}$).....	66
<i>Figure IV.7</i> : Distribution spatiale du champ de charges d'espace à différents instants de la décharge.	67
<i>Figure IV.8</i> : Variation temporelle du taux d'ionisation ($p=1\text{ atm}$, $v=57\text{ kv}$)	68
<i>Figure IV.9</i> : Variation temporelle du taux d'attachement ($p=1\text{ atm}$, $v=57\text{ kv}$)	68
<i>Figure IV.10</i> : Variation temporelle de l'énergie moyenne ($p=1\text{ atm}$, $v=57\text{ kv}$)	69
<i>Figure IV.11</i> : Variation du taux d'ionisation réduit en fonction du champ électrique réduit	72

Liste des tableaux

<i>Tableau I.1</i> : Production des espèces chargées (Processus primaires) [IEE 90].....	10
<i>Tableau I.2</i> : Production des espèces chargées (Processus secondaires) [IEE 90]	12
<i>Tableau I.3</i> : Les constantes A et B pour différents gaz ; et les gammes de E/N où la formule est valide	16
<i>Tableau I.4</i> : La tension d'étincelle pour différents gaz [MSN 95].	21
<i>Tableau III.1</i> : Extrait des études basées sur l'usage de la SMC	36
<i>Tableau IV.1</i> : Valeurs des coefficients macroscopiques pour différentes valeurs de la tension appliquée.....	70
<i>Tableau IV.2</i> : Effet du champ électrique réduit et de la pression	71

Remerciements

Je tiens à exprimer vivement mes plus profonds remerciements à tous les membres de mon jury, pour leur aide inestimable, leur patience, leur disponibilité et leurs encouragements, tout au long de ce travail.

Je les prie de croire ici en ma haute considération qu'ils m'ont fait l'honneur de participer à l'examen de mes travaux.

Je tiens aussi à remercier particulièrement :

- A. Bouldjedri Professeur à l'université de Batna de m'avoir fait l'honneur de présider mon jury
- L. Mokhnache Professeur à l'université de Batna directrice de ce travail, qui a proposé ce sujet et qui l'a suivi attentivement jusqu'à sa réalisation. Je souhaite qu'elle trouve ici mon respect et ma gratitude pour ses conseils, ses encouragements, sa disponibilité et surtout la confiance qu'elle m'a témoignée pour réaliser ce mémoire.
- M. Djebabra Professeur à l'université de Batna, qui a accepté de me recevoir et à ce plongé et pour l'intéressement et l'attention qu'il a accordés à cette étude.
- M. S. Mimoune Professeur à Université de Biskra qui accepté d'examiner ce travail.
- Toute ma famille, en particulier mes parents pour leur soutien indéfectible.
- Je voudrais que ceux qui ont participé de près ou de loin à la réalisation de ce travail trouvent ici le témoignage de ma reconnaissance.

Acronymes

AG	Algorithmes génétiques
CSM	Méthode des charges fictives
DP	Décharge partielle
MDF	Méthode des Différences Finies
MEF	Méthode des Eléments Finis
MEC	Méthode des Eléments de Contours
PG	Programmation Génétique
SMC	Simulation Monte Carlo
$F(x)$	La fonction de distribution
$f(x)$	La fonction densité de distribution
$\frac{E}{N}$	Le champ électrique réduit
V	La tension
d	La distance inter-électrodes
$v(\varepsilon)$	La vitesse de dérive des électrons
$Q(\varepsilon)$	La section efficace totale de collision
N	La densité du gaz.
$Q(\varepsilon)$	La section efficace
ε	L'énergie de l'électron
$\bar{\varepsilon}$	L'énergie moyenne des électrons
los	L'énergie perdue lors d'une collision
e	La charge de l'électron
E	Le champ électrique
(x, y, z)	Les composantes de la position de l'électron
dz	Le déplacement suivant l'axe des z
a	L'accélération
T	Le temps
dt	Pas du temps
e	La charge de l'électron.
m	La masse de l'électron.
θ	L'angle de déviation
ϕ	L'azimutal
n_0	Le nombre d'électrons initiaux
N_{pion}	Le nombre d'ions positifs
N_{nion}	Le nombre d'ions négatifs
r	Le nombre aléatoire
GVA	Générateur de variables aléatoires.

Introduction générale

1 Problématique

Dans les conditions usuelles, le milieu gazeux ne permet pas la conduction de l'électricité. Soumis à un champ électrique faible, un gaz pur est un isolant parfait. Le caractère d'isolement électrique tient au fait qu'un gaz ne contient pas suffisamment de particules chargées libres (électrons ou ions positifs) qui puissent assurer la conduction. Les gaz sont de bons isolants en ce qui concerne l'empêchement du claquage électrique entre autres dans les circuits de haute tension et dans les lignes de transmission.

Des électrons libres et des ions positifs ou négatifs peuvent apparaître si l'on soumet le gaz à un champ électrique de forte intensité ou à des températures suffisamment élevées, si on le soumet à un bombardement de particules ou encore s'il est soumis à un champ électromagnétique très intense.

Lorsque l'ionisation est assez importante, le gaz devenu plasma, est un fluide très conducteur. On distingue trois grandes catégories de plasma :

- **Les plasmas chauds (étoiles, plasma de fusion...)** : la température des ions et des électrons est supérieure à 10 millions de degrés. Le gaz est complètement ionisé. (Equilibre thermodynamique)
- **Les plasmas thermiques (arc électrique)** : la pression du gaz est relativement élevée ce qui augmente le nombre des collisions entre les particules (neutres, excitées, non excitées, ionisées) et qui favorise ainsi la transmission de l'énergie. Il en résulte un plasma qui se trouve dans un équilibre thermodynamique. Le gaz est presque totalement ionisé. (Equilibre thermique)
- **Les plasmas froids (décharges électriques dans les gaz)** : sous des pressions réduites (environ de 1 à 10^4 Pa), le libre parcours moyen est tellement long qu'il ne peut y apparaître de transmissions d'énergie importantes entre les particules que par collision d'électrons, donc aucun équilibre thermique ne peut se produire.

La connaissance des processus physiques qui expliquent la *décharge électrique* est d'une importance primordiale. La détermination des paramètres physiques et électriques de cette décharge sont d'une grande utilité dans l'étude de son développement. Ils peuvent être calculés par plusieurs méthodes dont nous citons deux :

- La méthode basée sur la résolution de l'équation de Boltzmann : dans cette méthode, les paramètres de transport sont déterminés une fois que l'on connaît la fonction de distribution des particules chargées.
- La méthode Simulation de Monte Carlo (SMC) : celle-ci est utilisée dans notre travail du fait qu'elle tient compte de plusieurs phénomènes aléatoires de la décharge et de ses acteurs.

La *Simulation Monte Carlo* permet de suivre les électrons l'un après l'autre le long de leur déplacement dans le gaz depuis leurs émissions jusqu'à leurs disparitions en tout instant et en tout point de la décharge. Grâce à la *Simulation Monte Carlo*, on peut déterminer la trajectoire et la vitesse de chaque électron.

2 Objectifs de l'étude

La décharge électrique se fait en appliquant un champ électrique sur les particules neutres du gaz. Les charges libres (électrons et des ions) se créent de l'interaction des atomes de ce gaz avec les rayons cosmiques ou avec les rayonnements électromagnétiques, par augmentation de la température, Ces charges libres accélérées par le champ électrique appliqué se heurtent créant de nouvelles particules chargées et neutralisant d'autres.

L'objectif de ce mémoire se résume à :

- Présenter les processus fondamentaux des décharges électriques dans les gaz, l'influence de quelques paramètres physiques et électriques sur l'amorçage de la décharge électrique et sur le claquage électrique.
- Présenter quelques modèles décrivant les phénomènes de décharges électriques dans les gaz.
- Découvrir les méthodes déterministes et heuristiques utilisées pour l'étude des décharges électriques dans les gaz.
- Présenter le principe de la *Simulation Monte Carlo*.
- Utiliser la *Simulation Monte Carlo* pour l'étude d'une décharge électrique, en calculant ses différents paramètres physiques et électriques.
- *Etudier* les influences de ces paramètres sur le développement de la décharge électrique et sur le claquage électrique.

Pour le calcul des ces paramètres, l'aspect aléatoire des décharges électriques nous a conduit à l'utilisation d'une méthode stochastiques dite Simulation Monte Carlo largement utilisée dans les phénomènes non déterministes.

3 Structure du mémoire

Afin, d'atteindre les objectifs assignés à notre travail, le présent manuscrit est constitué, en plus des annexes, d'une introduction et d'une conclusion générales, de deux grandes parties scindées à leur tour en quatre chapitres récapitulés ci-après.

Le premier chapitre est consacré à une présentation des processus fondamentaux des décharges électriques dans les gaz et à l'influence de quelques paramètres physiques et électrique sur l'amorçage de la décharge électrique. L'objectif de ce chapitre est de rappeler les fondements des décharges électriques dans les gaz et la nécessité de faire appel à la Simulation Monte Carlo pour pouvoir les simuler.

Les méthodes déterministes et probabilistes les plus utilisées pour l'étude des décharges électriques dans les gaz ainsi que les modèles physiques qui décrivent le phénomène sont détaillés dans le deuxième chapitre.

Le troisième chapitre est réservé entièrement à la *Simulation Monte Carlo* où l'on rappelle les éléments de base de la Simulation Monte Carlo, la génération des variables pseudo-aléatoires ainsi que son application pour la résolution de l'équation de Poisson.

Dans le quatrième et dernier chapitre, nous détaillons notre principale contribution qui consiste en une application de la Simulation Monte Carlo (avec ses deux variantes : à pas constant et à pas variable) pour l'étude d'une décharge où nous présentons les paramètres les plus significatifs dans l'avancement de cette dernière et qui sont : le facteur d'ionisation, le facteur d'attachement, l'énergie moyenne des électrons et leur vitesse de dérive. L'analyse des résultats obtenus nous permet de faire le point sur l'effet de la pression et de la tension sur le développement de la décharge ainsi que l'influence de quelques paramètres de simulation liés à la méthode adoptée sur la qualité des résultats.

Afin de dresser un bilan provisoire de notre travail, ce manuscrit est clôturé par une conclusion générale qui résume le travail accompli, les difficultés rencontrées ainsi que les perspectives envisageables.

Chapitre I : Physique des Décharges Electriques, Processus Fondamentaux

Sommaire du chapitre I

1 Introduction

2 Paramètres électriques et physiques

2.1 Champ électrique

2.2 Fonction de distribution des particules

2.3 Physique des collisions atomiques dans une décharge électrique

3 Processus de production des espèces chargées

3.1 Processus primaires

3.2 Processus secondaires

3.3 Emission du champ

4 Décharges électriques dans les gaz pour les petits intervalles

4.1 Le premier coefficient de Townsend

4.2 Le second coefficient de Townsend

4.3 Le coefficient de diffusion

4.4 Le claquage électrique (Condition d'entretien de la décharge électrique)

4.5 Loi de Paschen

5 Conclusion

Bibliographie du Chapitre I

1 Introduction

A leur état normal de température et de pression, les gaz sont des isolants parfaits [EKu 00]. Cependant, si l'on applique un champ électrique suffisamment intense entre deux électrodes mises dans un milieu gazeux, celui-ci devient plus ou moins conducteur et un claquage électrique se produit [MSN 95]. Les phénomènes complexes qui se produisent alors portent le nom de décharge électrique dans les gaz.

D'habitude une décharge électrique se crée essentiellement par les collisions des électrons avec les molécules du gaz. Il s'en suit la génération de nouveaux électrons et ions dans les avalanches de Townsend qui se développe jusqu'à l'établissement d'un état de maintenance. La décharge alors devient indépendante des sources extérieures qui produisent les charges électriques libres dans le gaz. L'efficacité des électrons comme producteurs de nouveaux ions, dépend de leur énergie et donc de leur libre parcours dans le champ électrique. Et comme les électrons dans une décharge ne sont pas mono-énergétiques on doit déduire leur fonction de distribution des énergies pour une étude quantitative. Finalement, l'application d'un champ électrique est nécessaire pour remplacer les électrons perdus par recombinaison, diffusion et, parfois, attachement [JMM 53].

Le but de ce chapitre est de présenter les processus fondamentaux des décharges électriques dans les gaz, l'influence de quelques paramètres physiques et électriques sur l'amorçage de la décharge électrique et sur le claquage électrique et aussi la présentation de quelques modèles décrivant ces phénomènes.

2 Paramètres électriques et physiques

Pour l'étude des décharges électriques il faut prendre en considération certains paramètres et leur influence sur le développement de la décharge électrique.

2.1 Champ électrique

Le champ électrique est le paramètre le plus important, parce qu'il est responsable de la production des décharges électriques (création des particules chargées). La connaissance des valeurs du champ électrique dans chaque point du domaine d'étude nous permet d'avoir des informations sur les phénomènes qui se manifestent dans les décharges électriques. Le champ électrique est gouverné par l'équation de poisson comme suit

$$\operatorname{div} \vec{E} = -\rho / \varepsilon_0 \quad (\text{I.1})$$

\vec{E} est le champ électrique, ρ étant la densité des charges électriques et ε_0 : la permittivité de l'espace libre.

D'où :

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}U \quad (\text{I.2})$$

2.2 Fonction de distribution des particules

Si on considère un gaz de N particules alors la fonction de distribution f de ces particules peut être définie comme étant le nombre de particules qui, à l'instant t , se trouvent dans les positions r et $r + dr$ dont la vitesse est comprise entre v et $v + dv$.

Donc :

f est une fonction du temps, de la position et de la vitesse

$$f \equiv f(t, r, v)$$

Pour les molécules polyatomiques, il y a d'autres coordonnées qui doivent être prises en compte tels que : les liaisons entre les atomes constituant les molécules et les angles entre ces liaisons.

En physique statistique il y en a trois fonctions de distribution qui sont [Joe 72], [Rei 97] : *Fermi Dirac*, *Bose Einstein* et celle de *Maxwell Boltzmann*

Si le gaz est en équilibre thermodynamique et l'énergie d'interaction entre ses particules est négligeable devant leur énergie cinétique, la fonction de distribution qu'on utilise est généralement *la fonction de Maxwell Boltzmann* définie par :

$$f_M = \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left(\frac{-mv^2}{2kT} \right) \quad (\text{I.3})$$

m , k et T étant, respectivement, la masse, la constante de Boltzmann et la température.

Les coefficients macroscopiques, que nous allons voir ultérieurement, tels que le premier coefficient de Townsend, le coefficient d'attachement sont obtenus grâce à la fonction de distribution des particules suivant les relations :

$$\frac{\alpha}{N} = \frac{1}{v} \left(\frac{2e}{m} \right) E \int \frac{1}{2} m v^2 \sigma_i(v) f(v) dv \quad (\text{I.4})$$

$$\frac{\eta}{N} = \frac{1}{v} \left(\frac{2e}{m} \right) E \int \frac{1}{2} m v^2 \sigma_{at}(v) f(v) dv \quad (\text{I.5})$$

α est le coefficient d'ionisation, η le coefficient d'attachement, $\frac{e}{m}$ le rapport de la charge de l'électron et sa masse, v la vitesse de dérive, E le champ électrique, $\sigma_i(v)$ et $\sigma_{at}(v)$ les sections efficaces d'ionisation et d'attachement, $f(v)$ la fonction de distribution des électrons et v la vitesse.

Aussi, en connaissant la fonction de distribution des vitesses des particules on peut déduire n'importe quelle valeur moyenne : la densité, la vitesse moyenne, les quantités de mouvement et l'énergie moyenne des particules constituant le gaz.

2.3 Physique des collisions atomiques dans une décharge électrique

Les phénomènes de collisions atomiques prennent une place importante en physique atomique et moléculaire, Ils jouent un rôle dans la physique *des décharges électriques*, physique des plasmas... Ces collisions se passent, soit entre les particules élémentaires et les systèmes atomiques, soit entre les systèmes atomiques eux-mêmes [BHB 82].

Si on considère un faisceau de particules A qui se dirigent vers une particule cible B ; trois processus peuvent être distingués:

- Les deux particules A et B sont diffusées sans aucun changement dans leur structure interne suivant $A + B \rightarrow A + B$: C'est ce qu'on appelle *collision élastique*
- Les deux particules A et (ou) B subissent un changement de leur état quantique interne par exemple $A + B \rightarrow A + B^*$
B* indique l'état excité de la particule B, de tels processus sont appelés *collisions inélastiques*
- Le système composé (A + B) [BHB 82] : se divise en deux particules C et D différentes de A et B suivant l'équation $A + B \rightarrow C + D$, Ou il en résulte plus de deux particules comme suit $A + B \rightarrow C_1 + C_2 + C_3$; Ce processus de collision est appelé *réaction*.

Les valeurs propres de l'équation de Schrödinger pour un tel atome donnent son spectre (ses niveaux d'énergie E_n) qui nous permet de calculer les fréquences des photons résultants des transitions entre ces niveaux et les énergies d'ionisation

- On dit qu'un atome est *excité*, quand un électron de sa couche externe reçoit une énergie suffisante pour passer d'un niveau énergétique à un autre supérieur. Ce phénomène est conditionné par les règles de sélection.
- On dit qu'un atome est *ionisé* lorsqu'un électron de sa couche externe subit une énergie suffisante pour l'extraire de cet atome.

Les paramètres qui caractérisent la dynamique des collisions sont : la section efficace de collision, la probabilité de collision, le libre parcours moyen et l'énergie de collision.

2.3.1 Section efficace

La section efficace est le nombre de collisions par unité de particules diffusées, et est le rapport du flux de particules incidentes par rapport à la particule cible. La section efficace est généralement indépendante du flux de particules incidentes alors on peut le mettre égal à l'unité.

Ainsi, la section efficace peut être aussi définie comme étant la probabilité de transition par unité de temps, par unité cible et par unité de flux de particules incidentes [BHB 82].

En mécanique quantique, l'expression de la section efficace peut être écrite comme suit [Alb 62] :

$$\sigma = \frac{J_{diff}}{J_i} \quad (\text{I.6})$$

Où la densité du courant de particules J est donné par :

$$J = \left(\frac{i\hbar}{2m} \right) (\psi \nabla \psi^* - \psi^* \nabla \psi) \quad (\text{I.7})$$

ψ : est la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + \varphi \right] \psi = \Xi \psi \quad (\text{I.8})$$

- la fonction d'onde diffusée

$$\psi^{diff}(r, \theta, \phi) = \exp(ikz) + f(\theta, \phi) \frac{\exp(ikz)}{r} \quad (\text{I.9})$$

- La fonction d'onde incidente

$$\psi^i(z) = \exp(ikz) \quad (\text{I.10})$$

La fonction d'onde incidente est normalisée, donc le dénominateur est égal à l'unité. Et l'expression de la section efficace devient [Alb 62] :

$$\sigma = \int |f(\theta)|^2 d\Omega \quad (\text{I.11})$$

Avec : $d\Omega = \sin \theta \cdot d\theta \cdot d\phi$

Puisqu'on a de différents types de collision, on peut définir de différentes sections efficaces pour chaque type. La section efficace totale est la somme de toutes les sections efficaces [BHB 82] :

$$\sigma_{tot} = \sigma_{el} + \sigma_i + \sigma_e + \dots \quad (\text{I.12})$$

2.3.2 Probabilité de collision

La probabilité de collision est définie comme étant le nombre moyen de collisions effectuées par une particule par unité de longueur. Elle est reliée à la section efficace par la relation suivante :

$$p = \frac{dn}{dx} = n\sigma \quad (\text{I.13})$$

n est le nombre de particules existantes dans le gaz et σ est la section efficace.

2.3.3 Libre parcours moyen

Le libre parcours moyen, λ est la distance moyenne parcourue par une particule entre deux collisions successives. La distance parcourue par une particule entre les collisions est une quantité aléatoire [GRa 03] :

$$\lambda = \frac{1}{p} \quad (\text{I.14})$$

Déduction probabiliste du libre parcours moyen

La particule, a la même chance de rentrer en collision avec une autre entre les positions r et $r + r dr$. Le nombre moyen de collisions par unité de longueur est $\frac{1}{\lambda}$.

On note par $P_0(r)$ la probabilité de non collision à une distance r et à une distance $r + dr$

$$P_0(r + dr) = P_0(r) \left(1 - \frac{dr}{\lambda} \right) \quad (\text{I.15})$$

Cette probabilité s'exprime par $\left(1 - \frac{dr}{\lambda} \right)$. Elle représente le facteur de probabilité de collision [Rei 97].

$$\frac{d}{dr} P_0(r) = -P_0(r) \frac{1}{\lambda} \quad (\text{I.16})$$

Après l'intégration de l'équation I.15 on obtient :

$$P_0(r) = \exp\left(-r/\lambda\right) \quad (\text{I.17})$$

Qui est une distribution de Poisson ; d'où la distance moyenne exprimée par :

$$\langle r \rangle = \int_0^{\infty} r P_0(r) \frac{dr}{\lambda} = \lambda \quad (\text{I.18})$$

3 Processus de production des espèces chargées

Une décharge électrique est basée essentiellement sur les processus de collision qui sont responsables de la production des espèces chargées (électrons, ions) ou des pertes (attachement, recombinaison ; que ce soit dans le volume (gaz) ou à la surface des électrodes. Elle dépend de nombreux paramètres tels que :

- Le type du gaz : nature, concentration, pression.
- La géométrie : forme des électrodes (plan-plan, cylindres coaxiaux, cylindres parallèles à diamètres égaux, cylindre -plan sphère -plan...), distance inter- électrodes.
- L'alimentation électrique : tension continue, alternative (fréquence, forme du signal, temps d'application, ...).

Les processus de production des espèces chargées sont classés en [IEE 90] : processus primaires et secondaires qui sont détaillés ci après.

3.1 Processus primaires

Ces processus se produisent dans le volume du gaz. Où on distingue les trois phénomènes: l'ionisation, la recombinaison et l'attachement.

3.1.1 Ionisation

Les électrons sont accélérés par le champ électrique appliqué, ils gagnent de l'énergie résultante de la force électrique ou des *chocs élastiques*. Ils rencontrent, dans leur chemin dans le volume, des atomes et des molécules qui rentrent avec eux en collision. A une énergie suffisamment haute, il en résulte des ions et des électrons secondaires [JMM 53], [EKu 00] : ceci est appelé *ionisation par chocs des électrons*.

En plus, les ions rentrent avec les particules du volume en collision où il peut y avoir une capture de l'électron de valence de ces ions par les particules qui s'ionisent : *ionisation par ions*.

Après une durée de vie τ , les particules excitées reviennent à leurs états fondamentaux en émettant des photons, chaque photon a une énergie $h\nu$. Les électrons des couches externes des particules rencontrés par ces photons les absorbent et sortent c'est *la photo ionisation*. Si le photon- qui entre en collision avec l'atome- a une énergie supérieure au potentiel d'ionisation de cet atome, il provoquera ainsi l'ionisation de celui-ci. L'ionisation sera d'autant plus facile que si l'atome est déjà excité.

Si le gaz est chauffé à une température suffisamment haute, un bon nombre d'atomes (atomes ou molécules) acquièrent une vitesse suffisamment grande pour produire de l'ionisation par collisions avec d'autres atomes : *C'est l'ionisation thermique*.

La formule de *Saha Boltzmann* indique comment se répartissent les atomes et les ions d'un élément donné entre les différents états d'ionisation successifs [EKu 00].

Les électrons qui possèdent une énergie suffisante peuvent extraire d'autres électrons des ions par le processus de *collision électron-ion*.

Lorsque la concentration des ions dans le gaz est non uniforme ; alors ces ions se déplacent des régions à haute concentration vers des régions de faible concentration. Le processus par lequel l'équilibre est réalisé est appelé *la diffusion*. Ce processus provoque :

- l'effet désionisant dans la zone où la concentration est élevée,
- l'ionisation dans la zone où la concentration est basse.

Tableau I.1: Production des espèces chargées (Processus primaires) [IEE 90]

<i>Processus</i>		
<i>N°</i>	<i>Représentation¹</i>	<i>Description</i>
1	$e + AB \rightarrow AB + e$	Diffusion élastique par électron (direct)
2	$e + AB \rightarrow AB^* + e$	Diffusion inélastique (excitation) par électron (direct) ²
3	$e + AB \rightarrow A + B + e$ $\Rightarrow A + B^* + e$	Dissociation par impact d'électron Excitation dissociative par impact ²
4	$e + AB \rightarrow A^+ + B^- + e$	Formation de paire d'ions
5a	$e + AB \rightarrow AB^- *$ $\rightarrow AB(AB^*) + e$	Attachement Diffusion élastique (inélastique)
5b	$\Rightarrow A + B^-$	Attachement dissociatif
5c	$\rightarrow AB^- + \text{énergie}^3$	Formation d'ion négatif
6a	$e + AB \rightarrow AB^+ + 2e$	Ionisation par impact
6b	$\rightarrow A + B^+ + 2e$	Ionisation dissociative
6c	$\rightarrow A^* + B^+ + 2e$	Excitation et ionisation dissociatives

¹ $AB(A)$ correspond à l'état non excité $AB^*(A^*)$ molécule (atome) excité le \Rightarrow indique que la collision peut produire des produits

² emission d'un photon peut suivre cette collision $AB^*(A^*) \rightarrow AB(A) + h\nu$

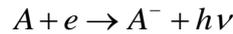
³ pour que AB^- soit formé, l'excès d'énergie de l'ion métastable $AB^- *$

La circulation des particules le long du gradient de concentration d'ions constitue une vitesse de groupe \bar{v} (ou de dérive). En présence du champ électrique, la mobilité μ est reliée à la vitesse de dérive par :

$$\mu = \frac{\bar{v}}{E} \quad (\text{I.19})$$

3.1.2 Attachement

Les types de collisions où les électrons deviennent attachés aux atomes ou aux molécules sont appelés l'attachement d'électron. L'attachement d'électron est un processus important qui dépend de l'énergie et de la nature du gaz. Les gaz atomiques ou moléculaires, ayant cette tendance sont ceux qui possèdent un ou deux électrons dans leur couche externe et ils sont appelés *gaz électronégatifs*. Le processus d'attachement est suivi de l'émission de photon et de libération d'une énergie cinétique E_c et d'une énergie d'affinité E_a



3.1.3 Recombinaison

La recombinaison des charges (positives et négatives) apparaît sous de différentes formes dont les principales sont les recombinaisons radiatives qui produisent de la lumière et la recombinaison par collision de deux corps.

3.2 Processus secondaires

Par *impact d'ions positifs* ayant des énergies supérieures ou égales à l'énergie de travail de la cathode, *les ions positifs* arrachent des électrons secondaires. Le nombre d'électrons résultants par ion incident dépend des conditions de la surface. L'ion a besoin de deux électrons, l'un pour sa neutralisation et l'autre pour s'arracher et aller dans le volume.

Les particules excitées perdent une fraction de leur énergie par collision dans le volume ou dans l'anode et il en résulte des particules à l'état métastable [GRa 03]. Ces dernières peuvent éjecter des électrons secondaires par *impacts* sur la surface de la cathode mais cette éjection est faible devant celle des ions.

L'énergie *des photons* arrivant à la cathode est utilisée pour extraire des électrons de sa surface et s'il y a un excès d'énergie, celle-ci se transforme en une énergie cinétique de ces électrons [EKu 00].

Le nombre de photons dans l'intra-électrodes est exprimé par :

$$n = n_0 \exp(-\mu x) \tag{I.20}$$

μ étant le coefficient d'absorption, n représente le nombre de photons et n_0 le nombre initial.

Tableau I.2: Production des espèces chargées (Processus secondaires) [IEE 90]

<i>Processus</i>		
<i>N°</i>	<i>représentation</i>	<i>description</i>
<i>Collisions photon-molécule</i>		
1	$h\nu + AB \rightarrow AB^*$	Photoabsorption
2a	$h\nu + AB \rightarrow AB^+ + e$	Photoionisation
2b	$\Rightarrow A + B^+ + e$	Photoionisation dissociative
3	$h\nu + AB \Rightarrow A + B^{(*)}$	Photodissociation avec (*)/sans excitation
4a	$h\nu + AB^-(B^-) \rightarrow AB(B) + e$	Photodétachement
4b	$\Rightarrow A^- + B$	Photodissociation d'ion négatif
<i>Collision ion-molécule (atome)</i>		
5	$AB^-(A^-) + C \rightarrow AB(A) + C^-$	Transfert de charge
6	$AB^-(A^-) + C \rightarrow AB(A) + C^-$	Détachement collisionnel
7	$AB^-(A^-) + C \rightarrow ABC(AC) + e$	Détachement associatif
<i>Collisions électron-ion et ion négatif-ion positif</i>		
<i>Recombinaisons</i>		
8a	$e + AB^+(A^+) \rightarrow AB^*(A^{(*)})$	Recombinaison électron-ion positif avec (*)/sans excitation
8b	$\Rightarrow A + B^*$	Recombinaison dissociative avec (*)/sans excitation
8c	$\rightarrow AB(A) + h\nu$	Recombinaison radiative
9	$A^- + e \rightarrow A + 2e$	Détachement par impact
11	$AB^*(A^*) + C \Rightarrow AB(A) + C^+ + e$	Ionisation de Penning
12	$A^* + B \rightarrow AB + e$	Ionisation associative

3.3 Emission du champ

L'électron peut être libéré du métal des électrodes en acquérant suffisamment d'énergie d'une source externe. Cette énergie peut être sous forme de température ou d'une radiation électromagnétique [EKu 00], [GRa 03]. On distingue trois formes d'émission du champ électrique :

- Lorsque l'électrode est chauffée, alors les électrons acquièrent suffisamment d'énergie pour s'échapper du puits de potentiel que représente cette électrode. Les électrons s'accumulent auprès de la surface de l'électrode et un courant se produit. La densité de ce courant est donnée par l'équation de *Richardson-Dushman* :

$$J = A_0 D T^2 \exp\left(\frac{-e\varphi}{kT}\right) \quad (\text{I.21})$$

$$A_0 = \frac{4\pi m e k^2}{h^3}$$

Avec :

J est la densité du courant, D est la constante de *Richardson*, T la température, k la constante de Boltzmann, m la masse, h constante de *Planck*, φ la fonction du travail,

- En présence d'un champ électrique fort, la fonction travail se réduit en :

$$\varphi_{eff} = \varphi - \sqrt{\frac{e^3 E}{4\pi\epsilon_0}} \quad (\text{I.22})$$

La densité du courant de *Schottky* est donnée par [EKu 00], [Rai 91]:

$$J = B_0 T^2 \exp\left(\varphi - \frac{\beta_s E^{1/2}}{kT}\right) \quad (\text{I.23})$$

$$\beta_s = \sqrt{\frac{e^3}{4\pi\epsilon_0}}$$

Où β_s est le coefficient de *Schottky*

- Dans un champ électrique fort, l'effet tunnel peut se passer même à la température ambiante. Le champ qui tire les électrons transforme le puits de potentiel en barrière de potentiel de manière que les électrons du niveau supérieur proche du niveau de Fermi auront une grande probabilité de franchir la barrière de potentiel. La densité de courant est donnée par l'équation de *Fowler Nordhim* comme suit [Rai 91], [GRa 03] :

$$J = \frac{e^3 E^2}{8\pi h \varphi} \exp \left\{ -\frac{4}{3} \left(\frac{2m}{h^2} \right)^{1/2} \frac{\varphi - \varepsilon_F}{eE} \right\} \quad (\text{I.24})$$

Pour simplification le courant peut s'exprimé comme suit :

$$J = CE^2 \exp \left\{ -\frac{D}{E} \right\}$$

4 Décharges électriques dans les gaz pour les petits intervalles

Si le champ électrique appliqué à un gaz est suffisamment intense, celui-ci devient plus ou moins conducteur et les phénomènes complexes qui se produisent alors portent le nom de décharge dans les gaz : ils sont dus à l'apparition d'électrons et d'ions libres.

Le développement des décharges électriques dans les gaz est géré par les coefficients macroscopiques : le premier et le second coefficient de Townsend et les coefficients de diffusion. Pour notre étude qui concerne les petits intervalles inter-électrodes, deux mécanismes (Townsend et streamer) sont présentés ci-après

4.1 Le premier coefficient de Townsend

Considérons un gaz sous pression (p) mis entre deux électrodes métalliques planes séparées par une distance (d) comme le montre la figure (I.1). Si aucun champ électrique n'est appliqué, alors un équilibre est établi entre les électrons et les molécules du gaz. Cet équilibre est perturbé lorsqu'on applique un champ électrique (E). Les électrons libres produits à la cathode se dirigent vers l'anode. Ils sont accélérés par le champ électrique. Lorsqu'ils acquièrent une énergie suffisante pour l'ionisation, il se produit de nouveaux électrons [EKu 00].

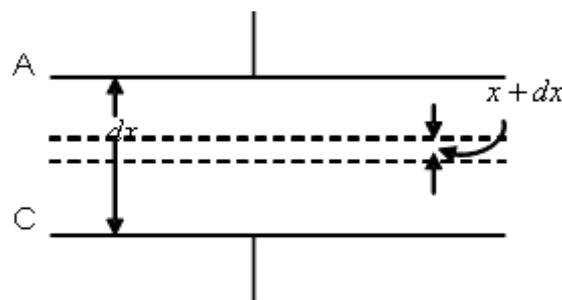


Figure I.1 : Schéma représentatif de l'intervalle inter- électrodes

Townsend a étudié la variation du courant en fonction de la tension appliquée, il a trouvé que le courant augmente en augmentant la tension et reste constant à I_0 qui correspond au courant de saturation. A des grandes valeurs de la tension appliquée, la variation suit une loi exponentielle. La variation du courant est représentée dans la figure (I.2).

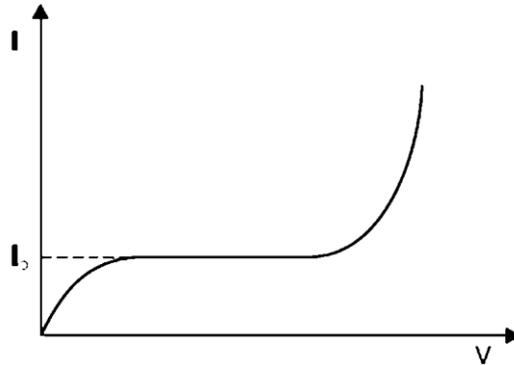


Figure I.2 : Variation du courant en fonction de la tension

Pour mieux comprendre le mécanisme de multiplication des électrons Townsend a introduit un coefficient dit le *premier coefficient de Townsend* α qui représente le nombre de paires électron-ion produites par un électron par unité de longueur.

$$dn = \alpha n dx \quad (\text{I.25})$$

$$\text{Or } \frac{dn}{n} = \alpha dx$$

Après intégration de l'équation entre A $x=0$ et $x=d$, on trouve que le nombre d'électrons augmente exponentiellement [EKu 00], [JMe 05] :

$$\ln n = \alpha x + A \quad (\text{I.26})$$

$$\text{A } x=0, n=n_0 \text{ donc : } \ln n_0 = A$$

$$\ln n = \alpha x + \ln n_0$$

$$n = n_0 \exp(\alpha d) \quad (\text{I.27})$$

En termes de courant :

$$I = I_0 \exp(\alpha d) \quad (\text{I.28})$$

Le terme $\exp(\alpha d)$ est appelé *avalanche électronique*, il représente le nombre d'électrons produit par un électron en se déplaçant de la cathode vers l'anode. Et α s'exprime par :

$$\alpha = AN \exp\left(-\frac{BN}{E}\right) \quad (\text{I.29})$$

Le tableau ci-dessous regroupe les valeurs des constantes A et B pour quelque gaz et les gammes de E/N où l'équation (I.29) est valide.

Tableau I.3 : Les constantes A et B pour différents gaz ; et les gammes de E/N où la formule est valide

gaz	$A [10^{-21} m^2]$	$B [Td]$	gamme de $E/N [Td]$
He	8.52	34	100 – 750
Ne	13.3	337	300 – 1200
Ar	34.9	534	300 – 1800
Kr	47.3	667	300 – 3000
Xe	72.8	1000	600 – 2400
H2	15.0	413	45 – 900
N2	35.8	986	300 – 1800
O2	19.7	576	150 – 400

$$1Td = 10^{-21} Vm^2$$

4.2 Le second coefficient de Townsend

Soit n_0 le nombre des électrons initial, n_+ le nombre d'ions résultants du bombardement ionique et n le nombre des électrons qui arrivent à l'anode. Le *second coefficient de Townsend* γ est défini comme étant le nombre d'électrons produits par un ion positif.

$$n = (n_0 + n_+) \exp(\alpha d) \quad (\text{I.30})$$

Le nombre d'électrons produits par le gaz est $n - (n_0 + n_+)$ chaque ion va générer γ électrons secondaires de la cathode et le nombre d'ions est donné par :

$$n_+ = \gamma [n - (n_0 + n_+)] \quad (\text{I.31})$$

$$n_+ = \frac{\gamma(n - n_0)}{(1 + \gamma)} \quad (\text{I.32})$$

Remplaçons n_+ par son expression dans l'expression de n on trouve :

$$\begin{aligned} n &= \left[n_0 + \frac{\gamma(n - n_0)}{(1 + \gamma)} \right] \exp(\alpha d) = \frac{(1 + \gamma)n_0 + \gamma n - \gamma n_0}{(1 + \gamma)} \exp(\alpha d) \\ &= \frac{n_0 + \gamma n}{1 + \gamma} \exp(\alpha d) \end{aligned}$$

Donc :

$$n(1 + \gamma) - \gamma n \exp(\alpha d) = n_0 \exp(\alpha d)$$

$$n[1 + \gamma - \gamma \exp(\alpha d)] = n_0 \exp(\alpha d)$$

Alors :

$$n = \frac{n_0 \exp(\alpha d)}{1 - \gamma(\exp(\alpha d) - 1)} \quad (\text{I.33})$$

En termes de courant

$$I = \frac{I_0 \exp(\alpha d)}{[1 + \gamma - \gamma \exp(\alpha d)]} \quad (\text{I.34})$$

Si on prend les deux processus (ionisation et attachement) et on néglige les autres processus, le nombre des électrons produits par collision dans une distance dx est [EKu 00] :

$$n = n_0 \left[\frac{\alpha}{(\alpha - \eta)} \{ \exp(\alpha - \eta)x \} - \frac{\eta}{(\alpha - \eta)} \right] \quad (\text{I.35})$$

En termes de courant sera:

$$I = I_0 \left[\frac{\alpha}{(\alpha - \eta)} \{ \exp(\alpha - \eta)x \} - \frac{\eta}{(\alpha - \eta)} \right] \quad (\text{I.36})$$

4.3 Le coefficient de diffusion

Le processus de diffusion est gouverné par un coefficient dit de diffusion qu'on peut obtenir en résolvant l'équation suivante :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \text{div} \Gamma = q \quad (\text{I.37})$$

En présence du champ électrique le flux

$$\Gamma_{\pm} = \pm n \mu_{\pm} E - D \nabla n \quad (\text{I.38})$$

Alors l'équation devient

$$\frac{\partial n}{\partial t} + [\pm n \mu_{\pm} \nabla E - D \nabla^2 n] = q \quad (\text{I.39})$$

4.4 Le claquage électrique (Condition d'entretien de la décharge électrique)

L'augmentation de la tension donne aux électrons suffisamment d'énergie cinétique pour induire l'ionisation des particules neutres du gaz par collisions. Les ions positifs aussi gagnent de l'énergie pour les émissions secondaires et la multiplication des électrons est régénérée. C'est le phénomène du claquage électrique et la décharge est dite autonome. Le courant va être maintenu.

4.4.1 Le mécanisme de Townsend

Mathématiquement la condition est exprimée par l'annulation du dénominateur dans les expressions du courant I [EKu 00], [GRa 03]:

$$\{\gamma(\exp(\alpha d) - 1) - 1\} = 0 \quad (\text{I.40})$$

(i) $\gamma \exp(\alpha d) = 1$

Cette équation est le *critère de Townsend* pour la formation de l'étincelle, on prend son logarithme

$$\ln\left(1 + \frac{1}{\gamma}\right) = \alpha d \quad (\text{I.41})$$

Le nombre de paires é-ion produites dans l'espace inter-électrodes par l'avalanche électronique est suffisamment grand. En bombardant la cathode, les ions positifs produisent des électrons secondaires il s'ensuit le processus d'avalanche. La décharge est dite autonome.

(ii) $\gamma \exp(\alpha d) > 1$

L'ionisation produite par les avalanches successives est cumulative. Plus $\gamma \exp(\alpha d)$ est grand plus la décharge étincelle se développe rapidement.

(iii) $\gamma \exp(\alpha d) < 1$

Le courant n'est pas maintenu.

4.4.2 Le mécanisme du streamer

Quand la différence du potentiel appliqué entre les électrodes atteignent le seuil du potentiel du claquage et quand l'amplification de l'avalanche atteint une taille critique, les charges de l'espace forment une sorte de dipôle; Les électrons, dans la tête de l'avalanche, sont plus rapides que les ions. Il en résulte un champ radial E_r , qui s'additionne vectoriellement au champ appliqué E_0 , donc celui-ci est modifié au voisinage de l'avalanche.

Le champ radial est donné par l'expression suivante :

$$E_r = 5.27 \times 10^{-7} \frac{\alpha \exp(\alpha x)}{\left(\frac{x}{p}\right)} \left[\frac{V}{cm} \right] \quad (\text{I.42})$$

Lorsque l'une des trois conditions suivantes est vérifiée :

- $E' \geq E_0$;
- $\int_0^x \alpha dx = 18 - 20$;
- le nombre de charges de l'avalanche primaire atteint 10^8 à 10^{10}

alors l'avalanche se transforme en un streamer (léger canal faiblement ionisé) qui poursuit la trace positive de l'avalanche primaire dans l'une ou dans les deux directions vers les électrodes. Les électrons des avalanches secondaires sont tirés par le champ.

Croissance des streamers :

Des photons énergétiques sont émis par les atomes excités dans les avalanches primaires provoquent la photoionisation au voisinage de l'avalanche primaire. Les électrons créés par les photons initient des avalanches secondaires et Le streamer se propage vers la cathode. [JMM 53], [Rai 91] (figure 1-3)

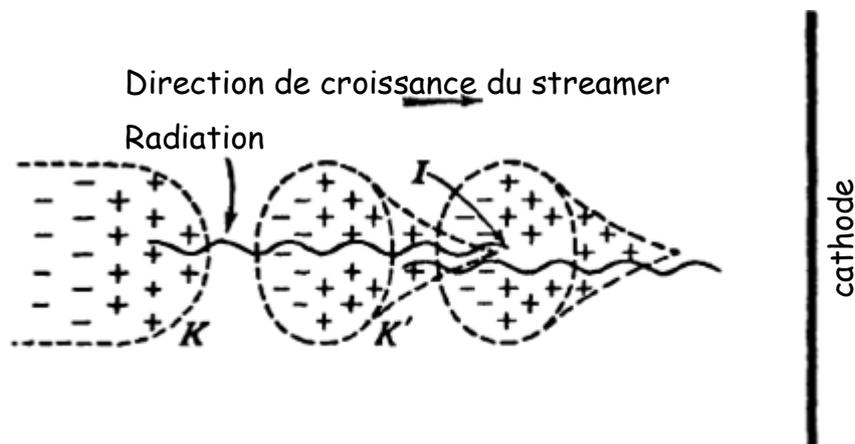


Figure I.3: Croissance du streamer positif [JMM 53]

A mi-chemin vers l'anode, l'avalanche se transforme en un streamer. La radiation émise par les atomes excités provoque la photo-ionisation, alors des avalanches secondaires se produisent en face de la tête du streamer négativement chargé. Les électrons du front qui se déplacent rapidement dans le champ $E_0 + E_r$ s'unissent avec les ions et forment ensemble le plasma. *C'est l'évolution du streamer vers l'anode* [Rai 91] (figure1-4)

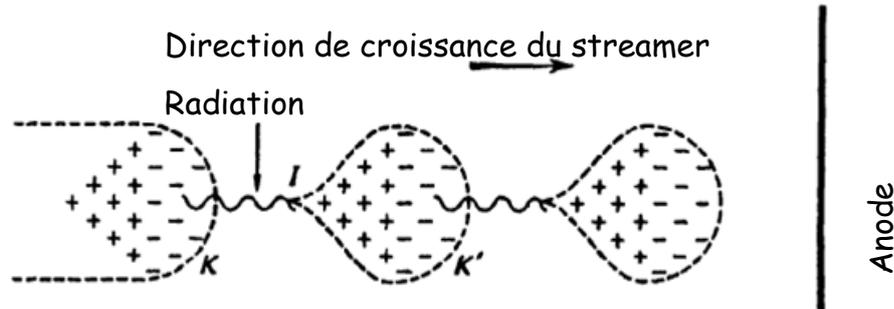


Figure I.4: Croissance du streamer négatif [JMM 53]

4.4.3 Temps de retard

Le claquage électrique ne se produit que lorsque le champ électrique appliqué est important et satisfait le critère reformulé par (équation I-37). L'intervalle de temps entre l'instant de l'application de la tension et le claquage complet est appelé temps du retard ; ce temps qui est composé de [GRa 03] :

- temps de retard statistique qui est le temps exigé pour un ou plusieurs électrons initiaux seraient dans la position favorable dans l'espace inter électrodes pour guider l'avalanche primaire,
- temps de retard formatif du claquage électrique.

4.5 Loi de Paschen

La condition du claquage électrique exprimée par I-38 est recombinaison avec l'équation I-26 nous permet d'obtenir l'équation suivante [Mom 02] :

$$Apd \exp\left(-\frac{Bp}{E}\right) = \ln\left(1 + \frac{1}{\gamma}\right) \quad (\text{I.43})$$

Si le champ électrique est appliqué entre deux électrodes planes et parallèles k, on a :

$$E = \frac{U}{d} \quad (\text{I.44})$$

Alors :

$$U = \frac{Bpd}{\ln \left[\frac{Apd}{1 + \frac{1}{\gamma}} \right]} \quad (\text{I.45})$$

$$U_e \equiv f(pd_e) \quad (\text{I.46})$$

Pour des valeurs de $pd > (pd)_{\min}$, les électrons font plus de collision avec les molécules du gaz qu'avec $(pd)_{\min}$; mais l'énergie de ces collisions est petite. Donc pour obtenir de l'ionisation et du claquage, un potentiel élevé doit être appliqué [EKu 00].

Afin d'illustrer nos propos, le tableau (I.4) donne quelques valeurs de la tension de claquage pour les différents gaz.

Tableau I.4 : La tension d'étincelle pour différents gaz [MSN 95].

gaz	$U_e \text{ min (V)}$	$pd \text{ à } U_e \text{ min (torr - cm)}$
Air	327	0.567
Argon	137	0.9
H_2	273	1.15
Hélium	156	4
N_2	251	0.67
O_2	450	0.7

5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons vu que le gaz devient conducteur lors de l'application d'un champ électrique fort. Le volume s'ionise, les paires é-ion se produisent et des électrons sont arrachés des surfaces des électrodes grâce aux processus de collision. La section efficace est un paramètre important qui nous donne des informations sur le type de collision et sa probabilité.

De même, l'évolution du claquage électrique est caractérisé par deux mécanismes fondamentaux : Townsend et Streamer qui expliquent le claquage sous les différentes conditions (pression, température, champ, nature des surfaces des électrodes...).

Nous avons remarqué également que les processus fondamentaux dans une décharge électrique ont une nature aléatoire qui peut être décrite par la technique de Monte Carlo qui sera présentée dans la suite du présent manuscrit.

Bibliographie du Chapitre I

- [Alb 62] A. Messiah, (1962). *Quantum Mechanics* (Vol. 2). Amsterdam: North Holland Publishing Company.
- [BHB 82] B.H. Bransden, C.J. Joachain, (1982). *Physics of atoms and molecules*. (L. P. Group, Ed.) Inland: Longman House.
- [EKu 00] E. Kuffel, W. S. Zaengl and J. Kuffel, (2000). *High Voltage Engineering Fundamentals (Newnes)* (2nd ed.). Butterworth-Heinemann.
- [GRa 03] G. G. Raju, (2003). *Dielectrics in Electric Fields (Power Engineering, 19)* (1st ed.). New York: CRC Press.
- [IEE 90] L. G. Christophorou, L. A. Pinnaduwege, (1990). *Basic Physics of Gaseous Dielectrics*. IEEE Transactions on Electrical Insulation , 25 (1), pp. 55-74.
- [JMe 05] J. Meichsner, (2005). *Plasma Physics*. Springer.
- [JMM 53] J. M. Meek, J.D.Craggs, (1953). *Electrical breakdown of gases*. Oxford: Clarendon Press.
- [Joe 72] J. H. Ferziger, & H G Kaper, (1972). *Mathematical Theory of Transport Processes in Gases*. North-Holland Pub. Co.
- [LSe 03] L. Settaouti, A. Settaouti and M. Sebbani. (2003). *Analysis of Low Pressure RF Glow Discharges Using Monte Carlo Method*. CNHT'2003 – 5^{ème} Conférence sur la Haute Tension – USTMB, (pp. 56-60). oran.
- [Mom 02] M. M. Pejovic, G. S. Ristic and Jugoslav P Karamarkovic, (2002). *Electrical breakdown in low pressure gases*. J. Phys. D: Appl. Phys. 35 , pp. R91–R103.
- [MSN 95] M. S. Naidu, (1995). *High Voltage Engineering* (2nd edition ed.). (t. M.-H. company, Ed.) New York: Quebecor/Book Press.
- [Rai 91] Y. P. Raizer, E. John Allen, V.I. Kisin, (1991). *Gas Discharge Physics* (1st ed.). (D. J. Allen, Ed., & D. V. Kisin, Trans.) Germany: Springer-verlag.
- [Rei 97] L. Reichel, (1997). *Modern cours in statistical physics*. A wiley-interscience publication.

Chapitre II : Modèles et méthodes pour l'étude des décharges électriques dans les gaz

Sommaire du Chapitre II

1 Introduction

2 Modèles physiques

2.1 Modèle cinétique

2.2 Le modèle fluide

3 Méthodes numériques

3.1 Méthode des Eléments Finis

3.2 Méthode des charges fictives

4 Méthodes heuristiques

4.1 Les algorithmes et la programmation génétiques

4.2 Les réseaux de neurones

5 Méthodes probabilistes

6 Conclusion

Bibliographie du Chapitre II

1 Introduction

Les décharges électriques sont largement rencontrées dans différents domaines. Plusieurs travaux ont été réalisés dans le cadre de la modélisation des décharges pour améliorer la compréhension des processus fondamentaux des décharges électriques dans les gaz, dont le but est d'obtenir de bons résultats.

Pour être fidèle à la réalité physique, un modèle doit reproduire aussi finement que possible les phénomènes physiques mis en jeu dans le système étudié. La tâche du modélisateur est donc tout d'abord d'identifier les caractéristiques principales du problème physique, et de les formuler mathématiquement. Du fait de la complexité des systèmes étudiés, cette représentation mathématique est liée au choix d'approximations et d'hypothèses qui rendent le problème soluble.

La formulation du problème fait apparaître le besoin de données permettant de quantifier les processus physiques de base. La recherche de ces données devient un point essentiel pour la modélisation des systèmes complexes dans lesquels un grand nombre d'espèces interagissent entre elles selon des procédés multiples.

La troisième étape fondamentale du développement du modèle, est le choix, ou le développement, de méthodes numériques qui permettent la résolution des équations choisies, en tirant parti au mieux des spécificités du problème, et des moyens de calcul disponibles.

Dans ce chapitre, nous présenterons les modèles physiques et les deux grandes familles de méthodes : les méthodes déterministes qui sont des méthodes qui se basent sur la résolution numérique des équations différentielles ou de systèmes d'équations, les méthodes heuristiques et les méthodes probabilistes qui portent sur le suivi du système en question tel qu'il évolue. Notamment chacune de ces méthodes a des avantages et des inconvénients.

2 Modèles physiques

2.1 Modèle cinétique

Ce modèle consiste à résoudre l'équation de Boltzmann indépendante du temps, couplée avec l'équation de poisson pour déterminer la distribution des vitesses ou des énergies des électrons.

L'équation de Boltzmann décrit l'effet du champ électrique appliqué E et des collisions sur la fonction de distribution $f(r, v, t)$. La fonction représente la densité des électrons, à un temps t , dans le volume entre r et $r + dr$ avec des vitesses entre v et $v + dv$.

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \cdot \nabla_r f - \left(\frac{e}{m} E \right) \cdot \nabla_v f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{II.1})$$

$$\nabla E = -\frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (\text{II.2})$$

Cette fonction est la solution de l'équation de Boltzmann qui peut être résolue par : les harmoniques sphériques multi-termes ou en utilisant la transformée de Fourier. Une fois la solution est trouvée ; la vitesse de dérive, le coefficient de diffusion radiale et les taux de collisions inélastiques peuvent être calculés en utilisant les définitions [SYo 83] :

$$W = -\frac{e E}{3 N} \left(\frac{2}{m}\right)^{1/2} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{Q_M(\varepsilon)} \frac{d}{d\varepsilon} f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{II.3})$$

$$D = \frac{1}{3N} \left(\frac{2}{m}\right)^{1/2} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{Q_M(\varepsilon)} f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{II.4})$$

$$k = \left(\frac{2}{m}\right)^{1/2} \int_0^{\infty} \varepsilon Q_j f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (\text{II.5})$$

Q_M , Q_j sont respectivement la section efficace du transfert du moment et les sections efficaces des différents types de collisions inélastiques

W , D et k sont, respectivement, la vitesse de dérive, le coefficient de diffusion radiale et les taux de collisions inélastiques. ε est l'énergie, m étant la masse et N la densité du gaz.

2.1.1 Transformée de Fourier

Le gain d'énergie dû au champ électrique est égal à la somme de toutes les pertes dues aux collisions [YSa 89]. Que ce soient les collisions élastiques ou inélastiques (excitation électronique, ionisation, recombinaison, excitation vibrationnelle et rotation.) L'équation de Boltzmann utilisée par Tagashira et al. [YSa 89] est de la forme suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_0^{\varepsilon} n(\varepsilon', z, t) d\varepsilon' = N_c(\varepsilon, z) + N_E(\varepsilon, z) + N_z(\varepsilon, z) \quad (\text{II.6})$$

$n(\varepsilon', z, t)$ est la densité des électrons. ε' , z et t sont, respectivement, l'énergie, la position et le temps. N_c , N_E et N_z sont les taux de changement dans la densité des électrons dus aux collisions, champ appliqué et le gradient.

La solution de l'équation de Boltzmann est écrite sous la forme du développement de Fourier [Gor 06]:

$$n_s(\varepsilon, z, t) = e^{isz} e^{-w(s)t} H_0(\varepsilon, s) \quad (\text{II.7})$$

Où s est la composante de Fourier

$$w(s) = -w_0 + w_1(js) - w_2(js)^2 + w_3(js)^3 + \dots \quad (\text{II.8})$$

Et w_n sont des constantes

$$H_0(\varepsilon, s) = f_0(\varepsilon) + f_1(\varepsilon)(js) + f_2(\varepsilon)(js)^2 + \dots \quad (\text{II.9})$$

2.1.2 Les harmoniques sphériques multi-termes

La fonction de distribution des particules chargées peut être écrite sous la forme suivante :

$$f(r, v, t) \equiv n(r, t)g(v, t) \quad (\text{II.10})$$

Où : $n(r, t)$ dépend de l'espace et $g(v, t)$ dépend des vitesses.

Et pour simplification on suppose que la fonction g est indépendante du temps.

$$g(v, t) = g(v) \quad (\text{II.11})$$

Et $g(v)$ est développée dans les harmoniques sphériques suivant [SYo 83]:

$$g(v) = \sum_{j=0}^{n-1} g_j(v)P_j(\cos \theta) \quad (\text{II.12})$$

Où P_j est une fonction de Legendre du ' $j^{\text{ième}}$ ' ordre. On fait un changement de variable de v à ε et on réécrit la fonction de distribution ; on trouve :

$$f(\varepsilon) = \sum_{j=0}^{n-1} f_j(\varepsilon)P_j(\cos \theta) \quad (\text{II.13})$$

$$\int_0^{\infty} \varepsilon^{1/2} f(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \text{ ou bien } \int_0^{\infty} F(\varepsilon) d\varepsilon = 1 \quad (\text{II.14})$$

$f(\varepsilon)$ Étant la fonction densité de distribution et $F(\varepsilon)$ la fonction de distribution des énergies.

Rappelons que Gerjan Hagelaar a réalisé un software (BOLSIG+ Electron Boltzmann equation solver) pour la résolution de l'équation de Boltzmann par l'approximation deux-termes [Ger 09].

2.2 Le modèle fluide

Le modèle fluide décrit le transport des particules chargées par des grandeurs moyennes, qui sont : la densité, la vitesse moyenne et l'énergie des particules chargées. On doit résoudre trois équations qui décrivent l'évolution spatio-temporelle de ces valeurs moyennes. Ces équations sont : l'équation de continuité, l'équation de quantité de mouvement et l'équation de l'énergie moyenne pour avoir, respectivement, les densités, les vitesses moyennes et l'énergie moyenne. Ces équations sont appelées moments de l'équation de Boltzmann et sont obtenues par l'intégration de l'équation de Boltzmann multipliée par les grandeurs macroscopiques physiques ($1, v, mv, \frac{1}{2}mv^2$).

Equation continuité

$$\frac{\partial n_e}{\partial t} = S + n_e \alpha |W_e| - n_e \eta |W_e| + n_e n_p \beta - \frac{\partial(n_e W_e)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial n_e}{\partial x} \right) \quad (\text{II.15})$$

$$\frac{\partial n_p}{\partial t} = S + n_e \alpha |W_e| - n_e n_p \beta - n_p n_n \beta - \frac{\partial(n_p W_p)}{\partial x} \quad (\text{II.16})$$

$$\frac{\partial n_n}{\partial t} = S + n_e \eta |W_e| - n_n n_p \beta - \frac{\partial(n_p W_p)}{\partial x} \quad (\text{II.17})$$

Où t est le temps. x la distance de l'anode. n_e , n_p et n_n les densités des électrons, des ions positifs et négatifs, respectivement. W_e , W_p et W_n sont les vitesses de dérive des électrons, des ions positifs et des ions négatifs, respectivement. Les symboles : α , η , β et D représentent, respectivement, les coefficients : d'ionisation, d'attachement, de recombinaison et de diffusion des électrons et S est le terme source dû à la photo-ionisation.

L'équation de Poisson est :

$$\nabla^2 \phi = -\frac{e}{\epsilon_0} (n_p - n_e - n_n) \quad (\text{II.18})$$

Où ϕ est la tension, e la charge de l'électron et ϵ_0 la constante diélectrique. Le champ électrique est calculé à partir de :

$$E = -\nabla \phi \quad (\text{II.19})$$

$$I = \int_0^d \left(n_p W_p - n_e W_e - n_n W_n + D \left(\frac{\partial n_e}{\partial x} \right) \right) Edx \quad (\text{II.20})$$

Equation de conservation de la quantité de mouvement

$$\frac{\partial}{\partial t} m v f + m v^2 \nabla_r f + m v a \nabla_v f = m v \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{II.21})$$

Equation de conservation de l'énergie

$$\frac{\partial}{\partial t} \frac{1}{2} m v^2 f + \frac{1}{2} m v^3 \nabla_r f + \frac{1}{2} m v^2 a \nabla_v f = \frac{1}{2} m v^2 \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (\text{II.22})$$

A. Hamid et al. [AHa 03] ont étudié la cinétique des électrons et des ions dans l'argon en présence d'une décharge luminescente basse pression en régime continu en introduisant un terme source constant. Le modèle développé dans leur travail est basé sur la résolution des deux premiers moments de l'équation de Boltzmann. Ces deux moments sont les équations de continuité et de transfert de la quantité de mouvement qui sont fortement couplées à l'équation de Poisson en utilisant l'approximation du champ local pour obtenir les caractéristiques de la décharge luminescente dans l'argon qui sont : les densités ioniques et électroniques, le champ électrique et le potentiel. Figures (II.1 et II.2).

Initialement, les densités ionique et électronique sont supposées égales à zéro sur les électrodes. Le potentiel à l'anode correspond à la valeur maximale de la tension appliquée à $x=d$ cm. Le potentiel à la cathode est nul pour $x=0$. La température et la pression du système sont constantes et égales, respectivement, à 293 K et 240 Torr. La distribution initiale des densités ionique et électronique est donnée par la relation suivante:

$$n_e = n_+ = 10^7 + 10^9 (1 - x/d)^2 (x/d)^2 \quad (\text{cm}^{-3})$$

Où d est la distance inter-électrodes. Les paramètres de transport utilisés dans son code pour l'argon sont consignés dans le tableau ci-dessous avec P dans la pression du gaz.

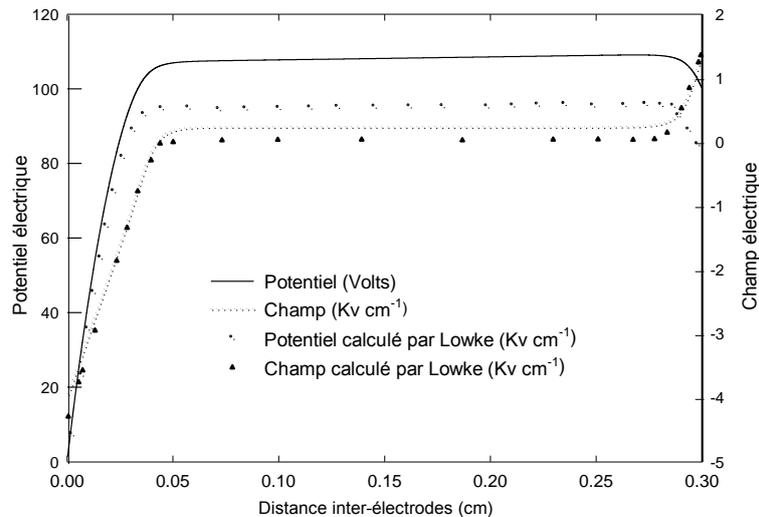


Figure II.1 : Distribution spatiale du potentiel et du champ électrique en régime stationnaire dans l'argon.

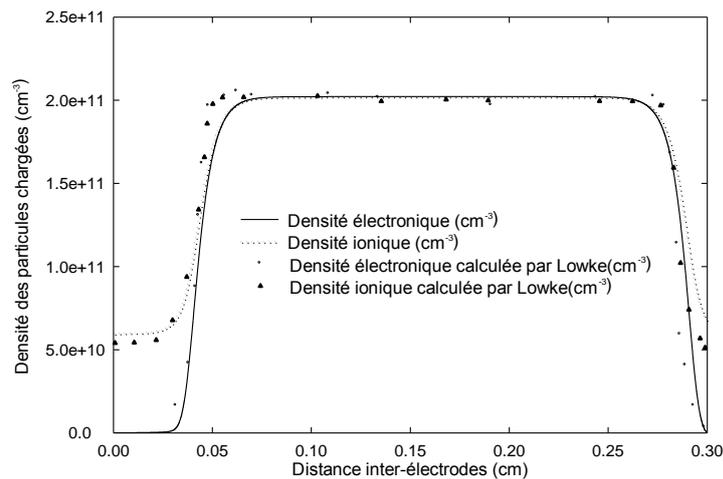


Figure II.2 : Distribution spatiale des densités ionique et électronique en régime stationnaire dans l'argon.

3 Méthodes numériques

Dans ce qui suit, nous rappelons les méthodes numériques les plus utilisées pour obtenir la distribution du champ électrique. Il s'agit des méthodes des Différences Finies (MDF), des Eléments Finis (MEF), des charges fictives (CSM) et des éléments de contours (MEC) que nous détaillerons ci-après.

3.1 Méthode des Eléments Finis

L. Mokhnache et al. [LMO 00] ont utilisé la méthode pour calculer les champs électriques des ions positifs des électrons créés à la tête de l'avalanche dans l'air contenu dans un intervalle inter-électrodes pointe-plan. Les calculs sont effectués en tenant compte de l'effet de la polarisation de la barrière isolante de permittivité.

La modélisation a été focalisée sur la formulation du champ. Où le champ électrique est la somme du champ électrique appliqué E_0 , du champ de charges d'espace qui est la somme des deux champs qui résultent (des électrons et des ions positifs) et du champ de polarisation. Le champ résultant est obtenu grâce à résolution des équations de Maxwell par la MEF. La figure (II.3) représente les trois situations (avec barrière, sans barrière avec et sans charges d'espace) pour une tension de 700kV.

La méthode des éléments finis ne cherche pas la solution directe de l'équation de Laplace comme dans le cas de méthode des différences finies (MDF). Elle repose sur le fait que, dans un champ électrostatique, l'énergie totale enfermée dans la région du champ acquiert une valeur minimale. Cela signifie que cette distribution de tension sous des conditions données de surface de l'électrode doit rendre l'énergie pour être un minimum pour le volume diélectrique donné.

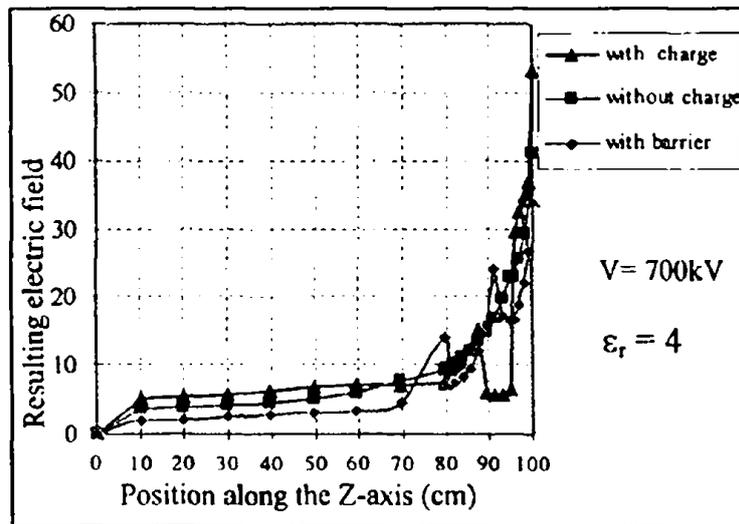


Figure II.3 : Champ électrique suivant l'axe Z avec et sans charge d'espace

3.2 Méthode des charges fictives

La procédure de modélisation se résume en deux phases : dans la première phase, la distribution des charges réelles sur la surface conducteur/ électrode ou sur les interfaces

diélectriques est remplacée par des charges fictives discrètes placées à l'intérieur des électrodes [Wad 07]. Ces sont disposées à l'intérieur du conducteur ou à l'extérieur de l'espace dans lequel le champ va être calculé. Les grandeurs de ces charges peuvent être calculées par la résolution d'un système linéaire. La deuxième phase de la méthode consiste à trouver la solution unique de l'équation de Laplace (ou de Poisson) à l'intérieur de l'espace inter-électrodes.

La position des charges est choisie de manière arbitraire, mais après une certaine expérience on arrive à réaliser dès le premier essai une configuration qui ne sera pas trop éloignée de l'optimum auquel on essaie d'arriver [FRo 03].

F. Rogti [FRo 03] a développé un code de calcul des champs électrostatiques basé sur la méthode des charges fictives dans les milieux contenant plusieurs diélectriques à la fois. La géométrie est obtenue par utilisation de l'environnement AUTOCAD. La figure (II.4) illustre Variation du champ électrique en fonction de la distance inter-électrodes pour différents diélectriques.

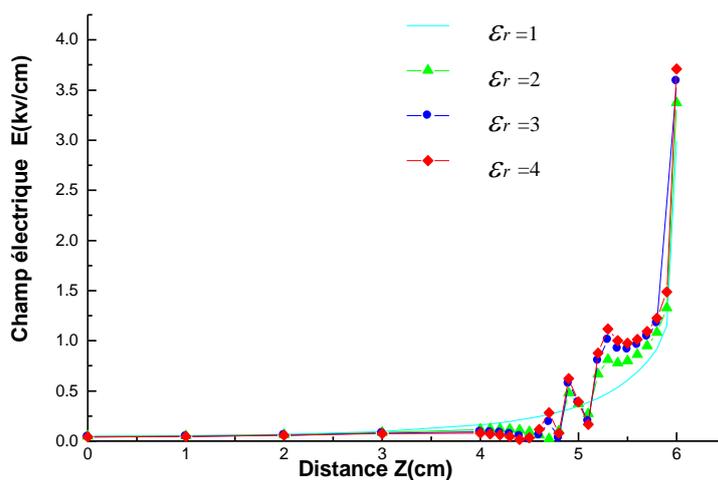


Figure II.4: Variation de E en fonction de la distance inter-électrodes pour les différents diélectriques

4 Méthodes heuristiques

4.1 Les algorithmes et la programmation génétiques

L'idée est de prendre un ensemble de solutions plus ou moins bonnes, et d'appliquer des transformations sur ces solutions afin de les améliorer. En répétant ces transformations, on espère atteindre un optimum (au moins local). On applique de plus une méthode de sélection qui consiste évidemment à conserver les meilleures solutions trouvées.

Les transformations utilisées s'inspirent de la biologie (d'où le nom) : elles consistent en la mutation (transformation légère d'un individu donnant un autre individu), le croisement (combinaison de deux individus) et la sélection (la probabilité d'être parent d'un individu de

la génération suivante croît selon les performances de l'individu pour le problème de départ) [Ama 05].

Et comme la méthode des algorithmes génétiques se révèle très efficace en pratique sur un grand nombre de problèmes, elle est utilisée aussi dans des études des décharges électriques [MAN 07].

La programmation génétique (PG) peut découvrir des relations entre les données observées et de les exprimer mathématiquement. L.Ruihua et al [LiR 03] ont proposé une architecture de la fonctionnalité de construction des décharges partielles. Ils ont appliqué la PG pour extraire et construire des éléments efficaces de données brutes. En outre, afin d'éliminer le goulot d'étranglement de la taille insuffisante des échantillons, ils ont intégré une sorte de technique statistique appelée rééchantillonnage « bootstrap » comme une étape de prétraitement dans la programmation génétique.

4.2 Les réseaux de neurones

Cette méthode s'appuie sur la mesure de l'écart entre les résultats réels et les résultats attendus. La minimisation de cet écart est réalisée grâce à l'apprentissage qui consiste à actualiser les paramètres sur la base de l'observation de couples entrées/sorties.

En utilisant une base de données expérimentales et la fonction de base radiale gaussienne comme outil L. Mokhnache et al. [LMO 01] ont développé un réseau de neurones pour la prédiction de la tension de claquage électrique d'une pointe-barrière-plan la figure(II.5) les valeurs mesurées et celles devinées par le réseau de neurones de 50% du claquage, pour un intervalle pointe-barrière-plane dans l'air avec différentes distances pointe-plan.

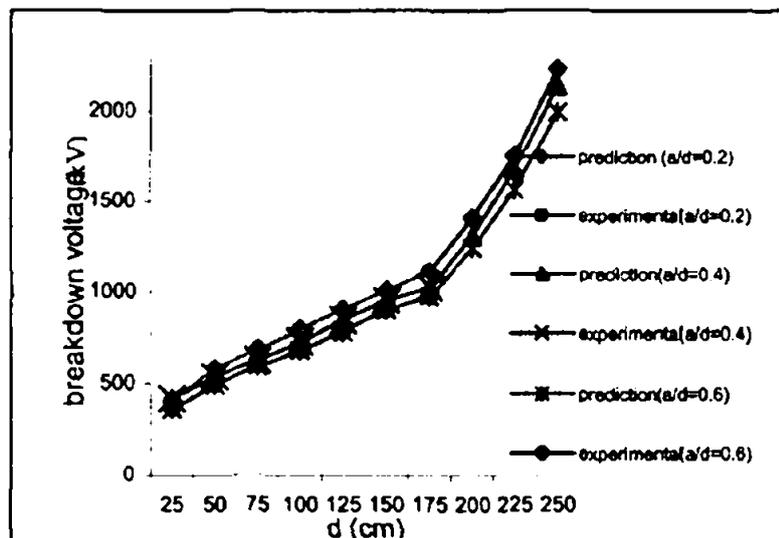


Figure II.5 : Variation de la tension du claquage électrique en fonction de la distance inter-électrodes.

N. Hozumi et al [Hoz 92] ont utilisé l'algorithme des réseaux de neurones pour la collecte des modèles de décharge partielle (DP) dans un diélectrique solide en utilisant des échantillons de résine époxy. Ceci s'est réalisé par la génération d'une arborescence électrique sous une tension alternative.

Les paramètres importants pour caractériser les décharges partielles sont: l'angle de phase, l'amplitude de la DP et la fréquence de la DP. Les modèles de DP sont composés de ces trois paramètres.

Les modèles de décharge partielle, avant et après l'ouverture d'arbres ont été initiés par le réseau de neurones avec la méthode de « back-propagation » à partir de bases de données expérimentale. Quand le processus d'apprentissage est terminé, les modes de décharges inconnues ont été mis dans le réseau pour discriminer les nouvelles formes de DP.

5 Méthodes probabilistes

Dans ce cas, les méthodes les plus utilisées sont la Monte Carlo et Particle In Cell [RKe 03], basées sur le suivi des trajectoires d'un grand nombre de particules dans le domaine d'étude. Le champ électrique étant calculé par résolution de l'équation de Poisson. Un traitement statistique permet d'obtenir les fonctions de distribution en énergie des particules, et d'en déduire les fréquences de collision correspondant au profil de champ donné.

6 Conclusion

Le problème central reste cependant la formulation mathématique du problème physique. La base d'un modèle général est la résolution simultanée des équations de Maxwell, pour le champ électrique, de l'équation de Boltzmann, écrite pour chacune des espèces produites dans la décharge. On obtient alors, les distributions du champ électrique, les fonctions de distribution des vitesses des particules en fonction de la position dans la décharge et du temps, dont on déduit toutes les autres grandeurs d'intérêt.

La résolution d'un tel modèle par les méthodes numériques exige un certain nombre d'approximations. La Simulation Monte Carlo est une méthode simple et tient compte de l'aspect aléatoire des processus d'ionisation. Le chapitre suivant présente les fondements de la méthode SMC.

Bibliographie du Chapitre II

- [AHa 03] A. Hamid, A. Bouchikhi, A. Hennad et M.Yousfi, (2003). *Détermination des caractéristiques électriques d'une décharge luminescente en 1D*. CNHT'2003 – 5ème Conférence sur la Haute Tension– USTMB, (pp. 67-69). USTMB. Oran.
- [Ama 05] A. AISSANI, (2005). *Modélisation et Simulation*. Alger: Office des Publication Universitaire.
- [Fro 03] F. Rogti, A.Mekhaldi, I. Lefkier , A. Choucha, (2003). *Simulation du champ électrique dans les milieux hétérogènes par la méthode des charges fictives*. CNHT'2003 – 5ème Conférence sur la Haute Tension– USTMB, (pp. 171-175). Oran.
- [Ger 09] G. Hagelaar. (2009, September 4). *BOLSIG+ Electron Boltzmann equation solver*. Retrieved juin 11, 2009, from LABORATORY ON PLASMA AND CONVERSION OF ENERGY-UMR5213: <http://www.laplace.univ-tlse.fr/groupe-de-recherche/groupe-de-recherche-energetique/projets-en-cours/bolsig-resolution-de-l-equation-de/?lang=en>
- [Gor 06] G. G. Raju, (2006). *Gaseous Electronics: Theory and Practice*. (Taylor & francis, Ed.) New York, London : CRC press.
- [Hoz 92] N. Hozumi, T. Okamoto, T. Imajo, (1992, June). *Discrimination of partial discharge patterns using a neural network*. IEEE transactions on Electrical Insulation, Volume: 27 (Issue: 3), pp. 550 - 556.
- [LiR 03] L. Ruihua, X. Hengkun, G. Naikui, S. Weixiang. (2003). *Genetic programming for partial discharge feature construction in large generator diagnosis*. Proceedings of the 7th International Conference on Properties and Applications of Dielectric Materials , (pp. 258 - 261 vol.1).
- [LMo 00] L. Mokhnache , A. Boubakeur, S. Boukhthache, (2000). *Numerical Model Describing the Effect(s) of a Barrier and the Space Charge Fields on the Electrical Strength of a Point-Plane Air Gap using the finite elements*. IEEE Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena, vol.2, pp. 466 - 469 vol.2. Victoria, BC.
- [LMo 01] L.Mokhnache , A.Boubakeur, (2001). *Prediction of the Breakdown Voltage in a Point-Barrier-Plane Air Gap Using*. IEEE Annual Report Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena, (pp. 369-372). Kitchener, Ont.
- [MAN 07] M. Debabrata ; K. P. Surjya ; SAHA Partha, (2007). *Modeling of electrical discharge machining process using back propagation neural network and multi-objective optimization using non-dominating sorting genetic algorithm-II*. Journal of materials processing technology (pp. 154-162). Amsterdam: Elsevier.

- [RKe 03] R. Kenneth Marcus, José A. C. Broekaert. (2003). *Glow Discharge Plasmas in Analytical Spectroscopy*. England: Wiley.
- [SYo 83] S. Yoshida and A. V. Phelps, (1983). *Effect of electrons produced by ionization on calculated electron-energy distributions*. Physical review A , 27 (6), pp. 2858-2867.
- [Wad 07] C. L. Wadhwa, (2007). *High voltage engineering* (2nd ed.). New Delhi: New age international (P) limited, Publishers.
- [YSa 89] Y Sakai, S Sawada and H Tagashira, (1989). *Boltzmann equation analyses of electron swarm parameters in Hg vappor: effect of metastable Hg*. J. Phys. D: Appl. Phys. (22), pp. 276-281.

Chapitre III : La Simulation Monte Carlo (SMC)

Sommaire du chapitre III

1 Introduction

2 Eléments de base de la SMC

2.1 Historique

2.2 Domaines d'application

2.3 Fondement de la SMC

2.4 Description de la SMC

2.5 Principe mathématique de la SMC

2.6 Méthodologie d'exécution de la SMC

2.7 Mise en œuvre de la SMC

3 Génération des variables aléatoires

3.1 La technique d'Inversion

3.2 La technique du rejet

4 Résolution de l'équation de poisson par la SMC

4.1 Discrétisation

4.2 Description

4.3 Organigramme

4.4 Résultats

5 Conclusion

Bibliographie du Chapitre III

1 Introduction

La Simulation Monte Carlo (SMC) est une méthode numérique non déterministe (probabiliste ou stochastique) qui consiste à exploiter des nombres aléatoires choisis pour simuler un problème mathématique (ou physique) complexe et à obtenir la solution recherchée de la conduite de ces nombres.

La SMC est utilisée dans de nombreux domaines, en particulier en physique nucléaire et en physique statistique. Par ailleurs, elle connaît des variantes en traitement du signal – sous l'appellation d'algorithmes d'approximation stochastiques, et en optimisation– la célèbre méthode du « recuit simulé ». Dans ce travail nous allons l'utiliser pour étudier des phénomènes stochastiques ainsi que pour la résolution de l'équation de Poisson [Sen 98].

Le recours à la SMC se justifie par le fait que les techniques de génération de nombres pseudo aléatoires sont indispensables pour la réalisation de nombreux modèles de systèmes naturels. En effet, le manque de connaissances en sciences de la vie, de l'environnement, et en physique, sur les structures de la matière entraîne l'élaboration de modèles stochastiques (basés sur l'introduction du hasard) pour reproduire le comportement des systèmes réels. La génération de nombres pseudo aléatoires s'impose comme une des techniques fondamentales pour la réalisation de simulations réalistes des phénomènes physiques [Lau 01].

L'objectif de ce chapitre est double : rappeler, dans un premier temps, les éléments de base de la SMC et illustrer, dans un second temps, l'usage de la SMC pour résoudre des équations aux dérivées partielles où l'on détaille un exemple de l'équation de Poisson avec les conditions de Dirichlet.

2 Éléments de base de la SMC

2.1 Historique

On remonte la naissance de la *SMC* au comte de Buffon (Georges Louis Leclerc ; 1707-1788, admis à l'académie des sciences en 1734), qui peut être présenté comme le précurseur de la *SMC*. En 1777, il posa le problème resté célèbre, dit « des aiguilles » que Laplace (Pierre Simon ; 1749 -1827) reformula en 1812 pour en déduire une méthode de calcul de π basée sur la réalisation d'expériences répétées¹ [Chr 99].

Le véritable développement de la *SMC* s'est produit lors de la seconde guerre mondiale (1940 - 1945), lors des recherches sur la fabrication de la bombe atomique. Ainsi, ces méthodes probabilistes ont été utilisées pour résoudre des équations aux dérivées partielles [Sen 98]. La *SMC* est utilisée pour simuler des systèmes déterministes avec des paramètres ou des entrées stochastiques. Le nom est proposé par des scientifiques du projet Manhattan (Stanislaw Ulam, Enrico Fermi, John Von Neumann, et Nicholas Métropolies) en référence à un célèbre casino de Monaco lors de la deuxième guerre mondiale et fait allusion aux jeux de hasard pratiqué à Monaco.

En plus, la construction des ordinateurs électriques à partir de 1945 était un facteur qui a contribué de même au développement de cette méthode, un développement qui a permis son expansion et son utilisation dans plusieurs domaines.

⁽¹⁾ L'annexe 1 présente le principe de cette méthode.

2.2 Domaines d'application

Tout le monde s'accorde sur l'usage très répandu de la SMC tels que : la résolution des équations algébriques, des équations différentielles ou intégrales, des problèmes d'optimisation complexes. D'une manière générale, l'usage de la SMC recouvre tous les domaines où l'utilisation des méthodes scientifiques se heurte à des difficultés. Dans ce contexte, on distingue deux grands domaines où la SMC a pu être utilisé avec succès :

- Phénomènes et processus aléatoires :
 - systèmes stochastiques de gestion ou de production (politique d'investissement, gestion de stocks, maintenance, ordonnancement, contrôle de qualité, ...),
 - systèmes de file d'attente (télécommunication, trafic, ...),
 - fiabilité des systèmes et sûreté de fonctionnement,
 - mouvement de particules nucléaires (processus de diffusion, ...),
 - reconnaissance de formes (analyse d'images, de paroles, ...),
 - modèles cybernétiques sous forme de graphes stochastiques (automates, commande, ...),
 - systèmes de commande décrits par des équations différentielles ordinaires ou des équations aux différences,
 - simulation d'ateliers de production.
- Phénomènes purement déterministes faisant appel aux calculs numériques :
 - calculs d'intégrales multiples ou stochastiques,
 - résolution d'équations intégrales,
 - résolution de systèmes d'équations algébriques,
 - calculs matriciels,
 - problèmes de Dirichlet,
 - résolution de problèmes d'optimisation combinatoire,
 - analyse de données.

Dans la suite de ce chapitre nous nous focalisons sur le second domaine où l'on rappelle quelques travaux basés sur l'usage de la SMC (cf. tableau III-1).

Tableau III.1 : Extrait des études basées sur l'usage de la SMC

<i>Titre</i>	<i>Auteurs</i>	<i>Description succincte de l'étude</i>
Monte Carlo simulation of a negative corona discharge in SF ₆	A.Mimouni and Y.Meslem	Etude d'une décharge couronne négative dans SF ₆ par la simulation Monte Carlo en tenant compte des processus d'ionisation, d'excitation, d'attachement et de photoionisation. La déformation du champ électrique par le champ de charges d'espace, l'évolution des avalanches et l'accumulation des ions positifs et négatifs sont détaillés [AMi 03].
Simulation of Corona Discharge Positive Corona in SF ₆	Jianfen Liu and G. R. Govinda Raju	Simulation d'une décharge couronne sous l'effet de différentes tensions entre une aiguille hyperboloïdale – plan pour deux densités du gaz, et suivis de l'initiation et du développement des avalanches successives en fonction du temps [Jia 94].
Etude d'une décharge lumineuse continue dans l'argon Par la méthode de Monte Carlo	Benyoucef Djillali et Belmadani Bachir	Utilisation de la méthode de Monte Carlo, pour simuler une décharge lumineuse continue, dans un gaz électropositif (l'argon), à une pression de 1Torr. Cette méthode a permis de coupler le mouvement des particules chargées avec l'équation du Poisson, aussi de calculer la distribution spatiale des courants électroniques et ioniques, la distribution de champ électrique et également la fonction densité de distribution des énergies électroniques dans le plasma [Ben 03].
Analysis of Low Pressure RF Glow Discharges Using Monte Carlo Method	L. Settaouti, A. Settaouti and M. Sebbani	Suivi des déplacements des électrons dans un gaz sous l'effet d'un champ électrique E par la simulation Monte Carlo. Durant les collisions successives de chaque électron, certaines informations (vitesse, position, etc.) sont stockées afin de calculer les coefficients macroscopiques et de transport les techniques d'échantillonnage [LSe 03]
Monte Carlo simulation of electron swarm parameters in O ₂	A. Settaouti and L. Settaouti	Les paramètres macroscopiques et de transport d'un gaz, soumis à un champ électrique, sont simulés grâce à la méthode de Monte Carlo. Les paramètres macroscopiques sont comparés avec les résultats expérimentaux [ASe 07].
Application de la Méthode de Monte Carlo dans le Calcul des Coefficients de Transport d'un Gaz Faiblement Ionisé	A. Benamar	Calcul des paramètres de transport dans un gaz faiblement ionisé, soumis à l'action simultanée des champs électrique et magnétique. Les paramètres calculés sont surtout : la vitesse de dérive, les fréquences d'ionisation et d'attachement, les coefficients d'ionisation et d'attachement, les coefficients de diffusion et la fonction de distribution [ABe 06].

Un examen rapide de la description des travaux regroupés dans le tableau III-1 montre que le principe de la SMC est basé sur la substitution du processus purement déterministe par un processus statistique équivalent. On obtient alors une approximation du processus initial avec une précision qui s'accroît avec le nombre d'expériences (ou d'histoires).

Ceci nous conduit à présenter dans la section suivante le fondement de la SMC.

2.3 Fondement de la SMC

La *SMC* est un procédé d'imitation artificielle d'un phénomène (ou processus) donné. L'usage de la *SMC* a pour but de prévoir son comportement (figure III-1). Pour cela, la *SMC* est basée sur l'utilisation de nombres aléatoires par informatique dont le but est de trouver, mesurer ou vérifier une solution d'un modèle quantitatif ou de décrire son comportement simulé et ses états transitoires.

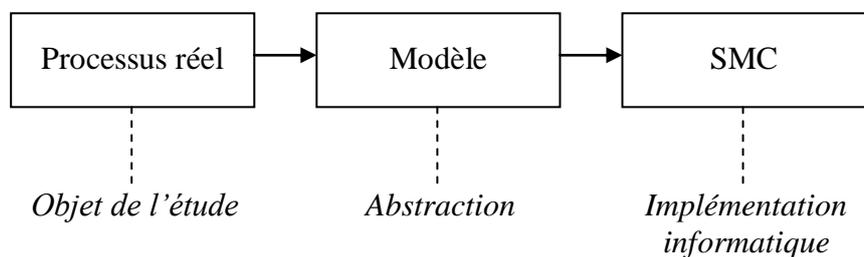


Figure III.1 : Fondement de la SMC

On désigne par le vocable générique de "Simulation Monte Carlo" toute méthode numérique utilisant le tirage de nombres aléatoires. La *SMC*, est une technique numérique spécifique pour solutionner des problèmes mathématiques en simulant des variables aléatoires. Elle est en général applicable à des problèmes de type numérique, ou bien à des problèmes de nature elle même probabiliste. Là où l'évolution du système en question n'est pas prédéfinie mais plutôt est de manière stochastique qui dépend d'une séquence de nombres aléatoires que l'on génère durant la simulation.

2.4 Description de la SMC

L'objet d'étude principal de la *SMC* est l'étude des phénomènes stochastiques. Ceci n'exclut pas qu'on s'intéresse à d'autres phénomènes, la grande souplesse de la *Simulation Monte Carlo* permettant parfois d'obtenir des conclusions à propos d'un phénomène très complexe, conclusions qui seraient inabordables par une approche classique. L'étude du phénomène se fait par la mesure de ses histoires ou par la mesure du comportement du modèle associé. Même s'il présente des aspects aléatoires, il reste qu'on peut tenter de décrire le phénomène en question, d'établir des régularités, de fixer certaines caractéristiques à travers les mesures prises (figure III-2).

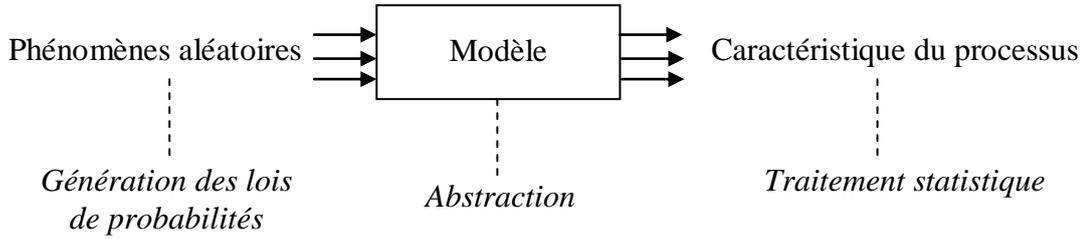


Figure III.2: But de la SMC

Pour la plupart des phénomènes qui sont objet d'étude leur complexité commande que l'on s'intéresse à plusieurs mesures à la fois, à plusieurs aspects conjoints; dans d'autres cas, un seul aspect, une seule mesure peut suffire. Cette mesure (unique ou multiple) d'un phénomène ou d'un modèle stochastique qu'on désigne sous le nom de *variable aléatoire*: est une quantité susceptible de présenter des valeurs différentes, et elle est *aléatoire* en un sens qu'elle redonne les mesures présumement changeantes d'un aspect stochastique.

2.5 Principe mathématique de la SMC

Soit à approcher la grandeur μ qu'il est difficile à évaluer par une méthode mathématique directe. On suppose qu'il existe une variable aléatoire X , c'est-à-dire une fonction $X = f(\omega), \omega \in \Omega = \{\omega\}$, telle que son espérance mathématique $E(x)$ approche suffisamment la grandeur μ avec une précision acceptable. L'algorithme de calcul de f doit être plus simple que celui du calcul de la grandeur μ à l'aide des méthodes connues : pour que la simulation ait un sens.

Le principe de la SMC consiste, à générer un échantillon $\{\omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots, \omega_n\}$ d'éléments de Ω de distribution P [Bré 09]. Alors, pour un échantillon de taille n suffisamment grande et en vertu de la loi des grands nombres :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(\omega_i) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i = E(X) = \mu \quad (\text{III.1})$$

Par conséquent, pour n suffisamment grand, on peut utiliser l'approximation :

$$\mu = \mu_n = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n X_i \quad (\text{III.2})$$

La précision d'une telle approximation peut être estimée à l'aide du théorème central limite [Sør 07], [BAN 98]: pour n suffisamment grand, μ_n est asymptotiquement de la loi normale de moyenne $E(X) = \mu$ et de variance $\sigma^2 = \text{Var}(X)/n$. On peut alors déterminer un intervalle de confiance de niveau $1 - \alpha$ (α petit) pour la grandeur μ :

$$\mu_n - u_{\alpha/2} \sigma / \sqrt{n} \leq \mu \leq \mu_n + u_{\alpha/2} \sigma / \sqrt{n} \quad (\text{III.3})$$

2.6 Méthodologie d'exécution de la SMC

La *SMC* est une méthode non déterministe pour l'évaluation d'un modèle déterministe utilisant un ensemble de nombres aléatoires comme entrées stochastiques. Cette méthode est souvent utilisée lorsque le modèle est complexe, non linéaire, ou implique quelques paramètres incertains. Elle peut généralement faire intervenir plus de 10000 évaluations du modèle, tâche qui dans le passé était seulement pratique en utilisant super calculateurs.

Les étapes à suivre dans une (SMC) sont les suivants [Gab 09]:

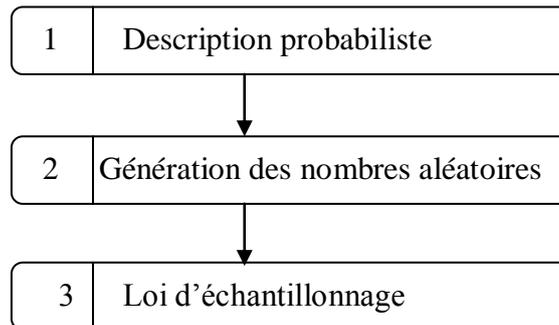


Figure III.3: Schéma représentatif des différentes étapes dans une SMC.

La figure ci-dessus montre que :

- dans l'étape 1, la *description probabiliste* consiste à créer un modèle qui représente un système complexe ou supportant un processus,
- dans l'étape 2, on procède à la *génération des variables aléatoires* uniformément distribués sur $[0, 1]$ moyennant un générateur de variables,
- enfin, la troisième et la dernière étape consiste en une exploitation des tirages de nombres aléatoires en fonction de description probabilistes pour élaborer *les lois d'échantillonnage*.

2.7 Mise en œuvre de la SMC

On distingue deux types de simulations selon le pas du temps : la simulation où l'incrément se fait à pas constant et la simulation à pas variable.

Le temps, dans la simulation à pas constant, est avancé à pas constant jusqu'au temps maximal de la simulation (figure III-4).

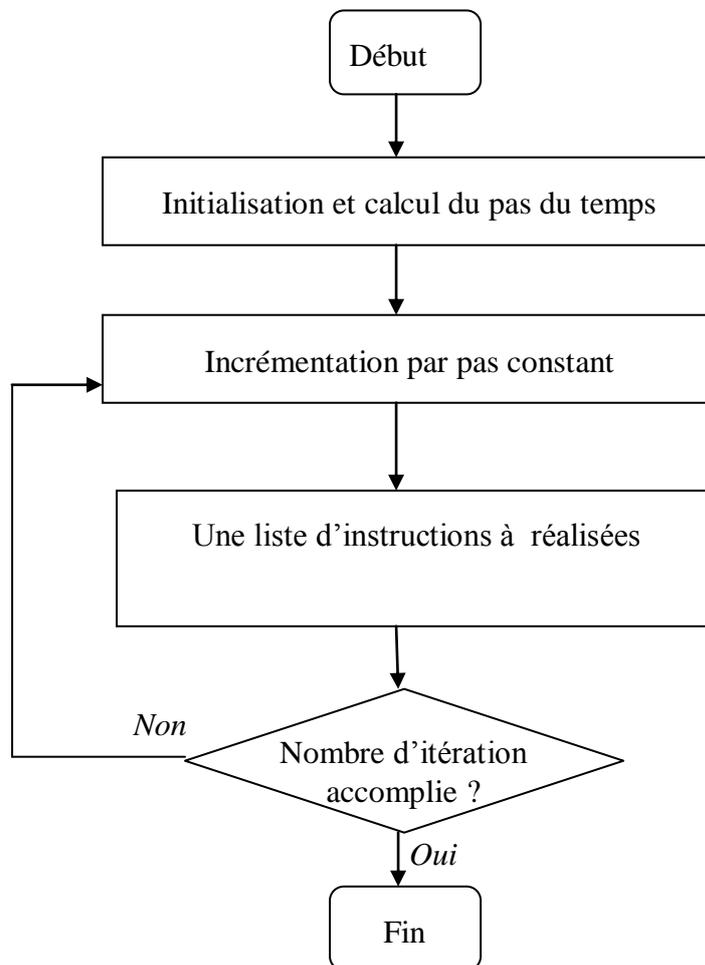


Figure III.4 : Simulation à pas constant

Le temps, dans la simulation à pas variable (figure III-5), est géré par l'horloge et par l'échéancier: L'horloge de la simulation est une variable qui enregistre le temps de simulation actuel qui est avancé dès qu'un événement se produit [Ama 05]. L'échéancier (liste d'évènements) joue le rôle de l'horloge centrale du système en sens que la séquence d'évènements activés donne une représentation de l'axe du temps [Pie 99].

Initialement l'horloge est mise à zéro et les événements futurs qui peuvent se produire sont insérés dans la liste selon l'ordre chronologique. L'événement suivant le plus proche est extrait de la liste pour exécution et l'horloge de simulation est avancée de la durée de temporisation de cet événement. L'état du système est mis à jour à la fin de cette durée. Les événements nouvellement créés sont insérés dans la liste et certains en sont extraits [Ama 05]. Ce processus est répété jusqu'à ce que l'une des deux conditions soit vérifiée : il n'y a plus d'événement qui puissent se produire ou bien le temps de simulation a expiré.

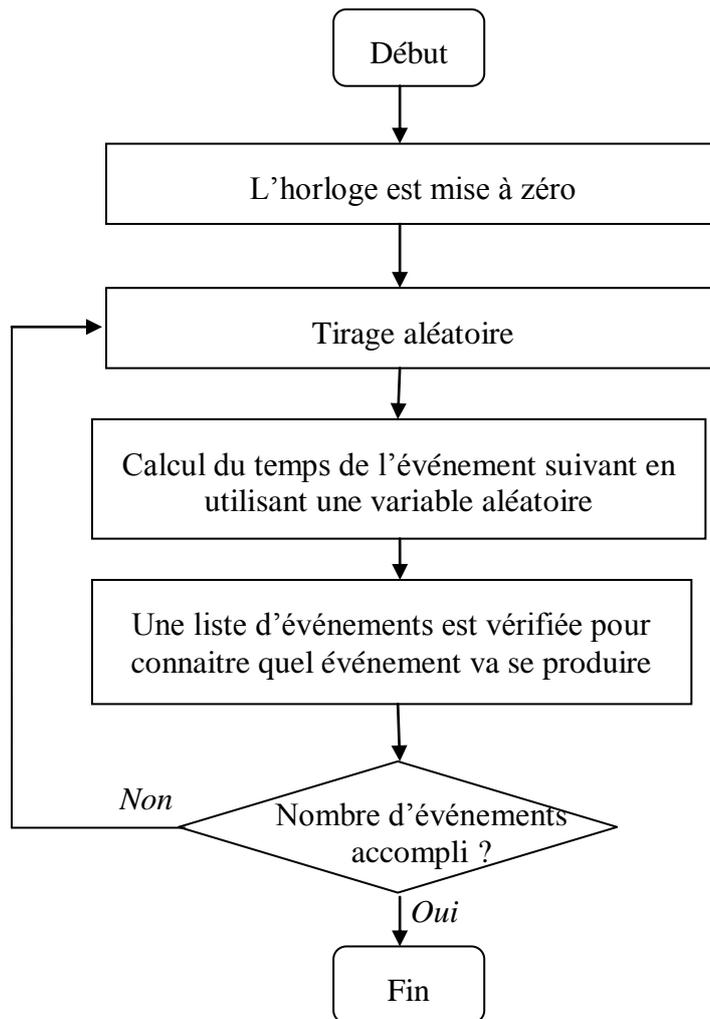


Figure III.5: Simulation à pas variable

Un examen rapide des éléments de base de la SMC rappelés jusqu'ici montre que l'outil de base de la SMC est bien le Générateur de Variables Aléatoires (GVA) qui sera détaillé ci-après.

3 Génération des variables aléatoires

L'outil de base de la SMC est la source capable de produire des nombres *au hasard* (*aléatoires*), c'est-à-dire une suite de variables aléatoires indépendantes et uniformément distribuées sur l'intervalle $[0, 1]$.

On appelle un générateur de nombres aléatoires, le mécanisme utilisé pour produire une séquence finie de variables aléatoires u_1, u_2, \dots, u_k dans l'intervalle $[0, 1]$ qui possèdent les propriétés suivantes :

- chaque u_i est uniformément distribuée dans l'intervalle $[0, 1]$,
- les u_i sont indépendantes,
- reproductibles,
- non répétitives pour une même histoire.

Il y a plusieurs types de générateurs de nombres aléatoires qui sont détaillés dans les différents ouvrages de simulation numérique. Tous ces générateurs respectent les quatre propriétés ci-dessus que nous détaillerons dans le tableau ci-après.

Tableau III-2 : Les propriétés des générateurs de nombres aléatoires

<i>Propriété</i>	<i>Description</i>
Longue période	La longueur du cycle est un indice de qualité de la suite générée et dépend du choix des paramètres. La longueur d'un cycle est définie comme étant la quantité de nombres pseudo aléatoires qui est générée avant d'obtenir la même séquence de nombres. Il est donc clair que le choix des paramètres du générateur influence la qualité de la suite de nombres pseudo aléatoires. L'indépendance entre les nombres pseudo aléatoires implique que la « longueur du cycle » soit suffisamment grande.
Répétition	Les séquences doivent être reproductibles, pour pouvoir répéter les simulations que cela soit dans des phases de vérification des codes de simulation ou plus simplement pour produire des résultats (statistiques) ; et pour certaines techniques de réduction de variance.
Vitesse	Les séquences doivent être générées rapidement avec des processeurs qui ont une capacité de mémoire limitée.
Portabilité	Le générateur doit pouvoir être exécuté sur tous les types d'ordinateurs standards. Il doit fournir les mêmes séquences sur tous les systèmes d'exploitation. Également, il doit être facile de « sauter » d'une valeur u_n à une autre u_{n+s} . De cette manière, on peut utiliser plusieurs sous séquences de la séquence u_0, u_1, \dots et considérer chaque sous séquence comme un générateur indépendant (ceci exige que la période de la séquence u_0, u_1, \dots soit assez grande pour le permettre).
Randomness (aspect aléatoire)	Les séquences de nombres pseudo aléatoires ne doivent pas présenter d'auto corrélation et doivent satisfaire et passer n'importe quel test statistique de caractère aléatoire et aussi être divisées en plusieurs sous séquences.

L'intérêt majeur du générateur de variables aléatoires est sa possibilité de générer des variables aléatoires discrètes non seulement sur $[0, 1]$ mais également sur $[a, b]$; avec a et b sont des entiers quelconques. Ceci est possible grâce à une technique dite d'inversion [MEJ 99].

Un autre avantage du générateur de variables aléatoires est également sa possibilité de générer des variables aléatoires continues non nulles sur un intervalle de R grâce à une méthode baptisée technique de rejet [Mal 08].

Afin d'illustrer nos propos, nous rappelons dans ce qui suit le principe des techniques d'inversion et de rejet.

3.1 La technique d'Inversion

La méthode de la transformation inverse s'appuie sur la propriété de monotonie non décroissante de la fonction de répartition $F(x)$ et sur la propriété $y = F(x)$.

Soit x une variable aléatoire avec fonction de répartition $F(x)$. La méthode de la transformation inverse d'échantillonnage de la variable x effectue les deux opérations suivantes [Ama 05] :

- un nombre u est tiré à partir de la distribution $U(0,1)$
- la valeur $X = F^{-1}(u)$ est calculée.

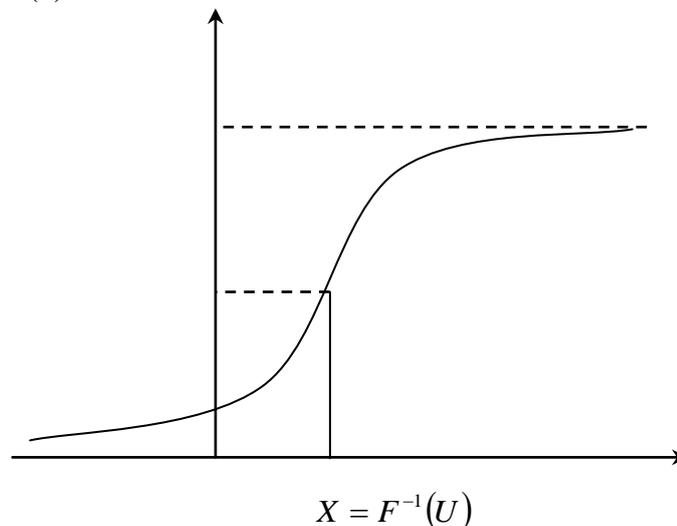


Figure III.6 : Illustration de la technique d'inversion

3.1.1 Loi sinusoidale

On peut générer une suite de nombres pseudo-aléatoires d'une loi sinusoidale en utilisant la relation :

$$X = \arcsin(U) \tag{III.4}$$

U est évidemment entre -1 et $+1$.

3.1.2 Loi uniforme

La distribution uniforme sur $[0,1]$ est caractérisée par :

$$f(x) = \begin{cases} \frac{1}{b-a} & \text{si } a < x < b \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{III.5})$$

Comme :

$$F(x) = \int_a^x f(x)dx = \int_a^x \frac{1}{b-a} dx = \frac{x-a}{b-a} \quad (\text{III.6})$$

Avec :

$$F(x) \in [0,1]$$

Si l'on cherche l'inverse de $F(x)$, la procédure est la suivante :

$$x = F^{-1}(U) \Rightarrow x = a + (b-a)U \quad (\text{III.7})$$

tel que : $U \in [0,1]$

3.1.3 Loi exponentielle

Rappelons qu'une variable aléatoire

$$f(x) = \begin{cases} \alpha \exp(-\alpha x) & \text{si } x \geq 0 \\ 0 & \text{si } x < 0 \end{cases} \quad (\text{III.8})$$

L'algorithme d'inversion de cette loi donne

$$X = -\{\log(1-U)/\alpha\} \quad (\text{III.9})$$

On montre que si $X \in [0,1]$, alors $X' = 1 - X \in [0,1]$ et le résultat de l'algorithme devient :

$$X = -\{\log(U)\}/\alpha \quad (\text{III.10})$$

Qui suit une loi exponentielle de paramètre α . Cela permet d'économiser le temps de calcul.

3.2 La technique du rejet

Cette méthode de simulation d'échantillons s'applique aux variables aléatoires continues X non nulles sur un intervalle de R . Dans le cas où la densité f est définie sur un intervalle $[a, b]$, il est possible de représenter la surface entre le graphe de la densité et l'axe des x à l'intérieur d'un rectangle, de choisir au hasard un point dans ce rectangle et de déterminer s'il est situé au-dessus ou au-dessous de la courbe $y = f(x)$. Cette idée est la clé de la méthode du rejet décrite ci-après [Ama 05].

Algorithme général de la technique du rejet

Plus précisément, soit $f(x)$ la densité de la variable aléatoire à générer et soit $g(x)$ une fonction de densité et c une constante positive telle que $f(x) = cg(x)h(x)$ pour toute valeur de X . On suppose que $g(X)$ la fonction de répartition associée, $G(x)$ est analytiquement connue ainsi que son inverse $G^{-1}(x)$ [Geo 03].

L'algorithme à suivre est alors le suivant :

- (i) Générer U_1 de distribution $U_1 \in [0,1]$
- (ii) Calculer $X = G^{-1}(U_1)$
- (iii) Générer U_2 de distribution $U_2 \in [0,1]$
- (iv) Si $c \times g(X) \times U_2 \leq f(X)$ alors on garde X comme donnée générée sinon on la « jette » et on recommence à l'étape (i).

Cette règle connue comme la "Golden Rule for Sampling" a été proposée par Von Neumann en 1951 [Geo 03].

Cet algorithme s'illustre facilement sur le graphique suivant :

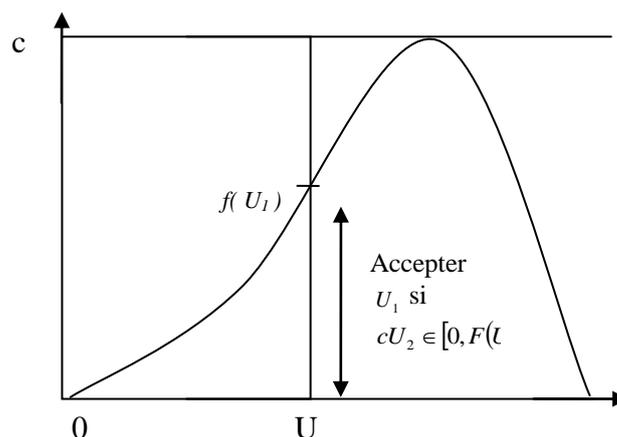


Figure III.7 : Illustration de la technique du rejet

4 Résolution de l'équation de poisson par la SMC

Le rappel des éléments de base de la SMC étant présenté dans la première partie de ce chapitre, cette deuxième partie se propose d'appliquer la SMC pour la résolution d'une équation de poisson. Dans ce contexte, notre choix s'est orienté vers l'utilisation de la simulation à pas constant.

4.1 Discrétisation

Notre but est d'intégrer dans le domaine rectangulaire R l'équation de Poisson qui est de la forme [Mat 00] :

$$\nabla^2 g + f(y, z) = 0 \quad (\text{III.11})$$

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial z^2} + f(y, z) = 0 \\ g = g_{\text{fon}} \end{cases} \quad (\text{III.12})$$

Après le maillage, on replace l'équation par son équivalent en différences finies

La dérivée première suivant y

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial y} &= \frac{g(y + \Delta, z) - g(y, z)}{\Delta y} \\ \frac{\partial g}{\partial y} &= \frac{g_{j+1,k} - g_{j,k}}{\Delta y} \end{aligned} \quad (\text{III.13})$$

La dérivée seconde suivant y

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} &= \frac{g(y + \Delta y, z) - 2g(y, z) + g(y - \Delta y, z)}{\Delta y^2} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial y^2} &= \frac{g_{j+1,k} - 2g_{j,k} + g_{j-1,k}}{\Delta y^2} \end{aligned} \quad (\text{III.14})$$

La dérivée seconde suivante z

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g}{\partial z^2} &= \frac{g(y, z + \Delta z) - 2g(y, z) + g(y, z - \Delta z)}{\Delta z^2} \\ \frac{\partial^2 g}{\partial z^2} &= \frac{g_{j,k+1} - 2g_{j,k} + g_{j,k-1}}{\Delta z^2} \end{aligned} \quad (\text{III.15})$$

La fonction f

$$f(y, z) = f(j\Delta y, k\Delta z) = f_{j,k} \quad (\text{III.16})$$

En remplaçant les équations (III.15) et (III.16) dans (III.11) on trouve :

$$\begin{aligned} & \left[g_{j+1,k} + g_{j-1,k} + g_{j,k+1} + g_{j,k-1} - 4g_{j,k} + f_{j,k} \right] / \Delta^2 = 0 \\ & g_{j,k} = p_{y+} g_{j+1,k} + p_{y-} g_{j-1,k} + p_{z+} g_{j,k+1} + p_{z-} g_{j,k-1} + \frac{\Delta^2 f_{j,k}}{4} \end{aligned} \quad (\text{III.17})$$

4.2 Description

Dans un repère cartésien orthonormé bidimensionnel dans le cadre des conditions de Dirichlet (on connaît, g sur la frontières de R). On superpose au domaine R un maillage rectangulaire dont les nœuds des mailles sont notés par les (j, k) . Une *Simulation Monte Carlo* pour le calcul de la fonction g au point particulier (J, K) consiste à décrire une suite de N chemins tous issus du point, (J, K) chacun de ces chemins se terminant tôt ou tard sur la frontière du domaine. Dès lors que l'on a atteint un point de la frontière, on note la fonction g ; de chaque point, et l'on recommence un nouveau chemin issu de (J, K) . Il est possible de montrer que la fonction en (J, K) est la moyenne des g_i (solutions du problème de Dirichlet) [Chr 99]

Donc, on peut écrire :

$$g = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N g_i(J, K) + \frac{\Delta^2}{4N} \sum_{i=1}^N \left[\sum_{j=1}^{m_j} f(y_j, z_j) \right] \quad (\text{III.18})$$

Il reste à déterminer la façon dont on décrit un chemin dans le maillage. On doit pouvoir atteindre chacun des plus proches voisins d'un point donné quelconque hors la frontière.

4.3 Organigramme

L'organigramme de la SMC de l'équation de poisson que nous avons retenu est fourni par la figure suivante :

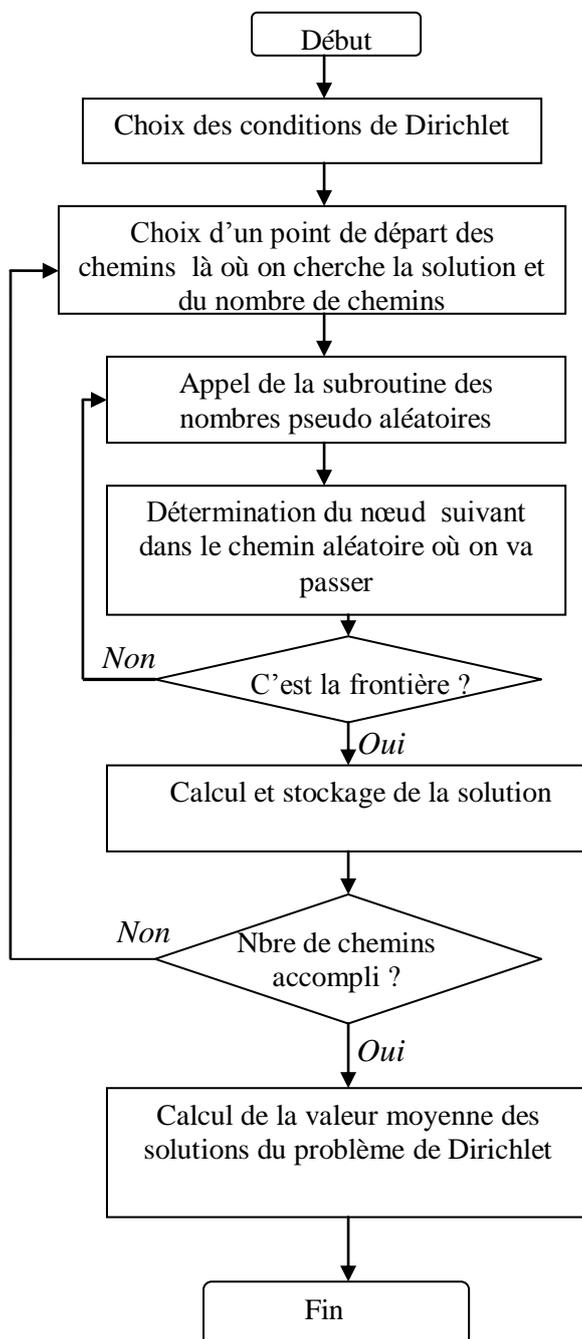


Figure III.8 : Organigramme de résolution de l'équation de poisson

4.4 Résultats

Si la fonction f est nulle, l'équation de Poisson devient une équation de Laplace. La figure ci-dessous montre la variation du potentiel, solution de l'équation de Laplace dans le point $(y_0, z_0) = (0.25, 0.75)$, en fonction du nombre de chemins.

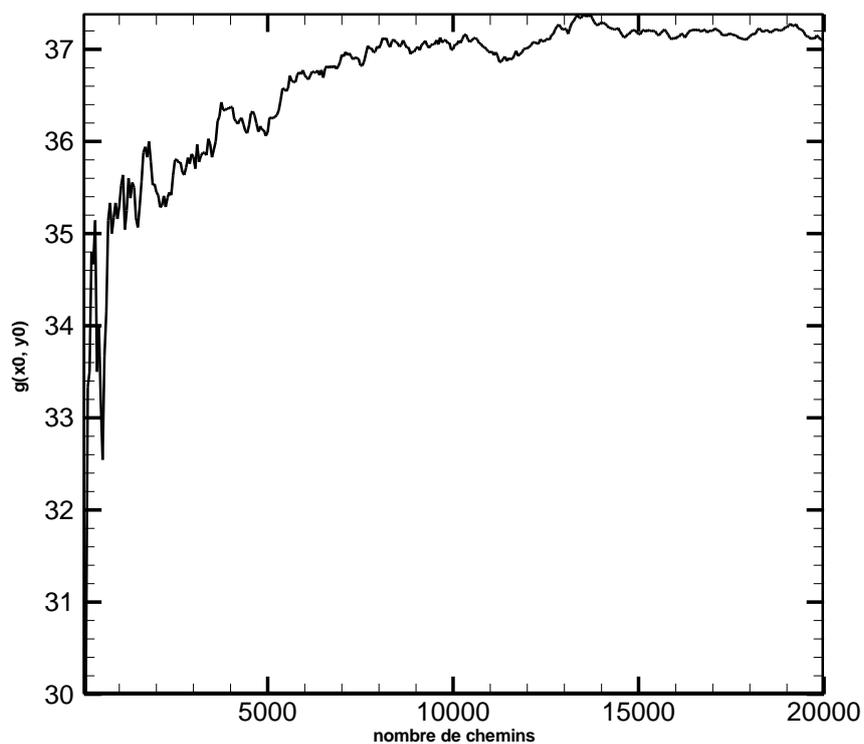


Figure III.9 : Variation du potentiel en fonction du nombre de chemins

5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté les éléments de base de la méthode SMC où notre intérêt s'est porté sur : le fondement de la SMC, son principe (avec les deux variantes : simulation à pas constant et simulation à pas variable) et enfin la génération des variables aléatoires.

Ces rappels, certes de base, ont été appliqués pour la résolution de l'équation de Poisson.

En conclusion de ce chapitre, nous pouvons dire que la SMC, comme toute approche scientifique, a des avantages et des inconvénients :

- *d'abord et pour ce qu'est des inconvénients de la SMC, citons le caractère approximatif de la méthode et le temps prohibitif de l'estimation des caractéristiques des processus étudiés,*
- *cependant ces inconvénients sont masqués surtout que l'usage de la SMC devient incontournable pour l'étude des processus complexes où l'application d'une méthode prime par rapport à la nature des résultats espérés,*
- *un autre avantage de la SMC est sa simplicité comparativement aux modèles mathématiques et autres méthodes d'étude et d'analyse des processus. En effet, la SMC est plus flexible que la modélisation strictement mathématique,*
- *enfin, un dernier avantage de la SMC est la disponibilité des outils informatiques (logiciels et langages de simulation).*

Les avantages multiples de la SMC, énumérés ci-dessus, nous ont conduits à retenir cette méthode pour l'étude du déplacement des électrons dans un gaz. Cette étude fera l'objet du chapitre suivant.

Bibliographie du Chapitre III

- [Abe 06] A. Benamar. (2006). *Application de la Méthode de Monté Carlo dans le Calcul des Coefficients de Transport d'un Gaz Faiblement Ionisé*. Mémoire de magister, université de TLEMCEM, Algerie.
- [Ama 05] A. AISSANI, (2005). *Modélisation et Simulation*. Alger: Office des Publication Universitaire.
- [Ami 03] A.Mimouni and Y.Meslem. (2003). *Monte Carlo simulation of a negative corona discharge in SF6*. CNHT'2003 – 5ème Conférence sur la Haute Tension – USTMB, (pp. 22-28). Oran.
- [BAN 98] J.BANKS. (1998). *Handbook of simulation : principles, methodology, advances, applications, and practice*. (J. Banks, Éd.)
- [Ben 03] B. Djillali et B. Bachir. (2003). *Etude d'une décharge luminescente continue dans l'argon Par la méthode de Monte Carlo*. CNHT'2003 – 5ème Conférence sur la Haute Tension – USTMB, (pp. 61-66). Oran.
- [Bré 09] P. Brémaud, (2009). *Initiation aux Probabilités et aux chaînes de Markov* (2^e édition). (S. Verlag, Éd.) Berlin: springer.
- [Chr 99] C.GUILPIN, (1999). *Manuel de calcul numérique appliqué*. EDP sciences.
- [Gab 09] G. A. P. CASTANEDA, (2009). *Evaluation par simulation de la sûreté de fonctionnement de systèmes en contexte dynamique hybride*. Thèse de doctorat de l'institut national polytechnique de Lorraine. Université de Nancy
- [Geo 03] G. S. Fishman, (2003). *Monte Carlo Concepts, Algorithms, and Applications* (2nd ed.). (S.-V. N. Inc, Ed.)
- [Jia 94] J. Liu and G. R. Govinda Raju, (1994). *Simulation of Corona Discharge Positive Corona in SF6*. IEEE transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, Vol. 1 No. 3, pp. 530-537. Canada.
- [Lau 01] L.Laurencelle, (2001). *Hasard, nombres aléatoires et méthode Monte Carlo*. Canada: Presses de l'Université du Québec.
- [LSe03] L. Settaouti, A. Settaouti and M. Sebbani, (2003). *Analysis of Low Pressure RF Glow Discharges Using Monte Carlo Method*. CNHT'2003 – 5ème Conférence sur la Haute Tension – USTMB, (pp. 56-60). Oran.
- [Mal 08] M. H. Kalos, P. A. Whitlock. (2008). *Monte Carlo Methods*.
- [Mat 00] P. Matthew and N. O. Sadiku, (2000). *Numerical Techniques in Electromagnetics* (2nd ed.). New York: CRC press.
- [MEJ 99] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, (1999). *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. New York: Oxford University Press.

- [Pie 99] Pierre-Jean Erard, Pontien Déguénon, (1999). *Simulation par événements discrets*. (P. P. (PPUR), Éd.) Presses Polytechniques et Universitaires Romandes
- [Sen 98] Sentis, Bernard Lapeyre Etienne Pardoux Rémi. (1998). *Méthodes de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion*. Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag.
- [Sør 07] Søren Asmussen and Peter W. Glynn, (2007). *Stochastic Simulation: Algorithms and Analysis*. New York: Springer.

Chapitre IV : Application de la SMC à la détermination des paramètres physiques d'une décharge électrique

Sommaire du Chapitre VI

1 Introduction

2 Le modèle

2.1 Génération des électrons initiaux

2.2 Résolution des équations du mouvement avant la collision

2.3 Traitement des collisions

3 Application des méthodes de la SMC

3.1 Simulation à pas constant

3.2 Simulation par événements

3.3 Calcul des paramètres électriques et physique de la décharge

4 Analyse et discussion des résultats

4.1 Effet du nombre d'histoires

4.2 Effet de la pression sur le développement de la décharge électrique

4.3 Effet de la tension

4.4 Vérification du critère du claquage pour différentes pressions

4.5 Validation

5 Conclusion

Bibliographie du Chapitre VI

1 Introduction

La détermination des paramètres électriques et physiques d'une décharge électrique est d'une grande importance du moment qu'ils constituent un lien entre les processus élémentaires de collision et le phénomène de la décharge électrique [HNK 79]. Les simulations stochastiques, connues également sous le nom Simulation Monte Carlo, répondent bien à ce type d'études.

La Simulation Monte Carlo (SMC), basée sur les lois stochastiques, est utilisée dans notre calcul vu qu'elle tient compte de plusieurs phénomènes aléatoires dans le processus de décharge électrique.

La SMC consiste à simuler un grand nombre d'évènements (particules chargées) par un autre ensemble facilement réalisable (variables aléatoires). Elle s'appuie sur le suivi des historiques de chaque individu d'une population dès son émission jusqu'à sa disparition [Ben 03]. Par la moyenne de ces historiques, de différentes propriétés peuvent être déterminées. Les concepts physiques de la SMC, appliquée à l'étude d'une décharge électrique, sont [GRa 03] : le temps moyen de vol, le libre parcours moyen ou la technique de collision nulle.

L'objectif de ce chapitre est de présenter l'apport de la SMC pour étudier et analyser les processus fondamentaux dans une décharge électrique en prenant en considération les différents processus de collisions atomiques (élastique ou inélastique). Les distributions des charges d'espace sont exploitées par la simulation de l'équation de poisson pour obtenir la distribution du champ électrique.

2 Le modèle

2.1 Génération des électrons initiaux

Les électrons initiaux sont émis à $T = 0$. Les composantes de la vitesse et les positions avant la collision sont données, pour chaque électron, par [Liu 95] :

$$\begin{aligned} v_{x0}(i) &= v_0 \sin(\theta(i)) \cos(\phi(i)) \\ v_{y0}(i) &= v_0 \cos(\theta(i)) \sin(\phi(i)) \\ v_{z0}(i) &= v_0 \cos(\theta(i)) \end{aligned} \tag{IV.1}$$

L'angle de déviation θ et l'azimutal ϕ sont choisis aléatoirement pour chaque électron suivant une distribution sinusoïdale [Abd 99].

$$\cos(\theta) = 1 - 2r_1 \tag{IV.2}$$

$$\phi = 2\pi r_1 \tag{IV.3}$$

Où r_1 est un nombre aléatoire choisi uniformément entre 0 et 1

Ces angles permettent de calculer la répartition des vitesses, après la collision, entre la particule incidente et la particule cible.

$$\begin{aligned}x_0(i) &= 0 \\y_0(i) &= 0 \\z_0(i) &= 0\end{aligned}\tag{IV.4}$$

$$v_0 = \sqrt{2\varepsilon_0 \frac{e}{m}}\tag{IV.5}$$

ε_0 est l'énergie d'un électron au début du pas du temps dt , e et m sont, respectivement, la charge et la masse de l'électron.

2.2 Résolution des équations du mouvement avant la collision

Entre deux collisions successives, les mouvements de l'électron sont conditionnés par la force extérieure d'origine électrique (champ électrique uniforme). Les trajectoires des électrons sont déterminées par résolution de l'équation de *Newton*.

Après un temps de vol dt et sous l'effet du champ électrique, E les nouvelles composantes de la vitesse sont données par :

$$\begin{aligned}v_x(i) &= v_{x_0}(i) \\v_y(i) &= v_{y_0}(i) \\v_z(i) &= v_{z_0}(i) + ad\end{aligned}\tag{IV.6}$$

a étant l'accélération qui est exprimée par :

$$a = \frac{e}{m} E\tag{IV.7}$$

Et où l'on considère que le déplacement des électrons s'effectue sur l'axe Z

Ainsi, les nouvelles positions s'écrivent comme suit :

$$\begin{aligned}x(i) &= x_0(i) + v_x(i)dt \\y(i) &= y_0(i) + v_y(i)dt \\z(i) &= z_0(i) + v_z dt + \frac{1}{2}a(dt)^2\end{aligned}\tag{IV.8}$$

Le gain d'énergie est gouverné par l'équation du mouvement et l'expression de l'énergie est donc la suivante :

$$\varepsilon(i) = \varepsilon_0(i) - eEdz \quad (\text{IV.9})$$

Où ε_0 et ε_1 sont, respectivement, les énergies avant et après la collision, e est la charge de l'électron, E étant le champ électrique et dz est donné par :

$$dz = z(i) - z_0(i) = v_z dt + \frac{1}{2} a(dt)^2 \quad (\text{IV.10})$$

2.3 Traitement des collisions

La section efficace totale est donnée par [ASe 07] :

$$Q_{tot} = Q_{el} + Q_{at} + Q_{rot} + Q_{vib} + Q_{elec} + Q_{ion} \quad (\text{IV.11})$$

Où Q_{el} , Q_{at} , Q_{rot} , Q_{vib} , Q_{elec} et Q_{ion} sont, respectivement, les sections efficaces des différents types de collision élastique, d'attachement, de rotation, de vibration, d'excitation et d'ionisation.

Pour déterminer le type de la collision, nous calculons les probabilités partielles en divisant les sections efficaces des différents types de collision sur la section efficace totale [ASe 073] :

$$\begin{aligned} P_{el} &= \frac{Q_{el}}{Q_{tot}} \\ P_{at} &= \frac{Q_{at}}{Q_{tot}} \\ P_{rot} &= \frac{Q_{rot}}{Q_{tot}} \\ P_{vib} &= \frac{Q_{vib}}{Q_{tot}} \\ P_{elec} &= \frac{Q_{elec}}{Q_{tot}} \\ P_{ion} &= \frac{Q_{ion}}{Q_{tot}} \end{aligned} \quad (\text{IV.12})$$

Où P_{el} , P_{at} , P_{rot} , P_{vib} , P_{elec} et P_{ion} sont, respectivement, les probabilités partielles de collision élastique, d'attachement, de rotation, de vibration, d'excitation et d'ionisation. A une énergie ε quelconque la somme des probabilités est égale à l'unité (respect de l'axiome des probabilités totales).

L'intervalle $[0, P_1]$ est divisé en segments de longueurs qui correspondent aux probabilités des différents types de collision après ordonnancement croissant de ces probabilités. Le reste une portion d'intervalle dans le cas où aucune collision n'est possible. Ceci est valable pour la simulation à pas constant que l'on détaillera ci-après.

L'énergie correspondante aux différents types de collision

Quand le type de la collision est déterminé, nous pouvons calculer l'énergie selon les cas:

- Après un processus de collision élastique, l'énergie cinétique de l'électron est donnée par la relation suivante :

$$\varepsilon_1 = \left(1 - 2 \frac{M}{m} \cos(\delta)\right) \varepsilon_0 \quad (\text{IV.13})$$

Où : m/M est le rapport de la masse de l'électron à la masse de la molécule qui est égal pour l'oxygène à $0.170E-04$.

δ est l'angle de diffusion axial dans le repère de collision. Il est donné par la relation suivante :

$$\cos(\delta) = (w_0 w_1) + (s_0 s_1) + (u_0 u_1) \quad (\text{IV.14})$$

$$w = \sin(\theta) \cos(\phi)$$

$$s = \sin(\theta) \sin(\phi) \quad (\text{IV.15})$$

$$u = \cos(\theta)$$

Les indices 0 et 1 indiquent avant et après la collision

- L'excitation d'une molécule à un état supérieur défini (différentes rotations, vibrations et états électroniquement excités) diminue l'énergie de l'électron instantanément avec l'énergie los exigée pour exciter la molécule.

$$\varepsilon_1(m) = \varepsilon_0(m) - los \quad (\text{IV.16})$$

los est l'énergie perdue lors d'une collision

- En cas d'ionisation, l'énergie restante est partagée entre l'électron père et l'électron éjecté de la molécule ionisée suivant les équations :

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{primère}} &= r_1 (\varepsilon_0(m) - los) \\ \varepsilon_{\text{éjecté}} &= (r_1 - 1) \times (\varepsilon_0(m) - los) \end{aligned} \quad (\text{IV.17})$$

Où r_1 est un nombre aléatoire issu d'une distribution uniforme entre 0 et 1

L'attachement de l'électron mène à la perte de toute son énergie. Et par conséquent sa disparition ($\varepsilon_1 = 0$).

3 Application des méthodes de la SMC

Pour cela nous avons utilisé les deux variantes de la SMC qui sont les suivantes :

- *Pas constant* : la décision de collision pour chaque électron dans un pas du temps dt est faite par comparaison d'un nombre aléatoire avec la probabilité de cette collision (issue de densité de distribution de poisson)
- *Pas variables (ou simulation par événements discrets)* : la date d'occurrence de la collision est obtenue aussi de la loi de poisson grâce à la technique d'inversion (cf. chapitre III)

3.1 Simulation à pas constant

L'application de la Simulation à pas constant pour l'étude du mouvement des électrons sous un champ électrique exige l'évaluation, après les procédés de pertes et de gain de l'énergie, de différents paramètres. En prenant en considération les différents processus de collisions atomiques (élastique ou inélastique), nous faisons un suivi pour un groupe d'électrons.

3.1.1 Concepts de base

Les concepts physiques de la Simulation à pas constant, appliquée à l'étude d'une décharge électrique, sont : le libre parcours moyen et le libre temps moyen de vol.

A Le libre parcours moyen

Dans un champ électrique uniforme, l'électron se déplace sur un chemin parabolique jusqu'à ce qu'il rentre en collision avec les molécules du gaz. Le libre parcours moyen est exprimé par [GRa 03] :

$$\lambda = \frac{1}{N \cdot Q(\varepsilon)} \quad (\text{IV.18})$$

Où $Q(\varepsilon)$ est la section efficace en m^2 et ε est l'énergie de l'électron en ev . Comme $Q(\varepsilon)$ est une fonction de l'énergie, λ dépend de la position et de l'énergie de l'électron.

Le libre parcours moyen est divisé en petites fractions

$$ds = \frac{\lambda}{nbrpas} \quad (\text{IV.19})$$

Où $nbrpas$ est généralement choisi entre 10 et 100. Et la probabilité qu'un électron rentre en collision avec la molécule, dans cette étape distance, est calculée suivant la relation :

$$P1 = \frac{ds}{\lambda} \quad (\text{IV.20})$$

Comme ds est choisi le plus petit, la probabilité reste constante dans ce segment

B Le libre temps moyen de vol

Le libre temps moyen de vol d'un électron se déplaçant avec une vitesse $v(\varepsilon)$ est donné par [Abd 99] :

$$Tm = \frac{1}{N \cdot Q(\varepsilon) \cdot v(\varepsilon)} \quad (\text{IV.21})$$

Où : $v(\varepsilon)$ est la vitesse de dérive des électrons, $Q(\varepsilon)$ est la section efficace totale de collision et N est la densité du gaz.

La probabilité de collision, qui doit être considérée comme une constante durant l'intervalle du temps dt , est donnée par [ASe 07] :

$$P1(t) = \frac{1}{Tm} \exp\left(-\frac{t}{Tm}\right) \quad (\text{IV.22})$$

3.1.2 Initialisation et choix de quelque paramètres

Evidement, la simulation à pas constant est conditionnée par le choix d'un certain nombre de paramètres, à savoir :

- *Choix du gaz* : pour ceci nous utilisons un tableau à 2D pour représenter la section efficace totale et les probabilités des différents types de collisions qui correspondent aux différentes énergies. Le gaz choisi est l'oxygène dont les sections efficaces sont données par [Phe 05].
- *Choix des paramètres du domaine d'étude* : dans cette étude nous avons deux types de paramètres (les variables et les constantes). La tension appliquée et la pression qui sont des variables. Les paramètres constants sont: la distance inter-électrodes ($d = 2$ cm) et la température qui est 273°K .
- *Choix des paramètres de la simulation* : idem nous avons retenu le nombre d'électrons initiaux ($n_0 = 1000$) l'énergie initiale ($\varepsilon = 0.1\text{eV}$), le temps maximal de simulation ($T_{\max} = 30$ ns) et le nombre d'histoire comme paramètres constants, en ce qui concerne les paramètres variables nous avons la position, la vitesse et l'énergie des électrons (avant et après la collision) qui sont déterminées par la simulation.

3.1.3 L'algorithme²

1. Calcul du libre temps moyen de vol $Tm(\varepsilon)$
2. Réalisation d'une boucle de 10^3 pour refaire N fois le temps max
3. Calcul du pas du temps .Le temps de vol actuel est calculé pour tous les électrons de l'échantillon
4. Génération des électrons initiaux ($N_e = 10^3$)
5. Simulation de la vitesse et la position de chaque électron. Les composantes de la

² Pour l'organigramme, voir l'annexe 2

- vitesse et les positions initiales sont données, pour chaque électron, par l'équation (IV.1).
6. Accélération d'un électron par le champ électrique E Après un temps de vol dt et sous l'effet du champ électrique E , les nouvelles composantes de la vitesse sont fournies par l'équation (IV.8)
 7. Détermination du gain d'énergie (équation (IV.9)).
 8. Détermination du type de la collision : calcul de la probabilité de collision $P1$ (équation (IV.22)) et comparaison du nombre aléatoire avec les probabilités des différents types de collision :
 - 8.1. Attachement : $N_{nion} = N_{nion} + 1, N_e = N_e - 1$
 - 8.2. Ionisation : $N_{pion} = N_{pion} + 1, N_e = N_e - 1$
 - 8.3. Collision élastique excitation : aucune particule n'est produite ni disparue.
 - 8.4. pas de collision, aller à (10. →électron suivant).
 9. Détermination des paramètres de l'électron après la collision (énergie et vitesse)
 10. (électron suivant)
 11. Calcul des paramètres macroscopique de la décharge
 12. Si $T < T_{max}$, incrémenter le temps $T = T + dt$ réinitialiser le générateur et aller à (4.) si l'un des critères suivants est vérifié aller à (14.)

$$\begin{cases} n_0 \exp(\alpha d) \approx 10^8 \\ \alpha d \approx 18 \\ E_r \approx E_0 \end{cases}$$

Tel que $E_r = 5.27 \times 10^{-7} \frac{\alpha \exp(\alpha x)}{\left(\frac{x}{p}\right)}$
 13. Si le nombre max d'histoires est atteint aller en (14.) sinon aller en (2.)
 14. Traitement statistique (calcul des moyennes)

Au lieu de compter les collisions des différents électrons qui peuvent avoir lieu durant un pas du temps, on peut d'une manière alternative s'intéresser aux instants d'occurrence des collisions [Ama 05].

3.2 Simulation par événements

En utilisant un nombre aléatoire r uniformément distribué entre 0 et 1, nous obtenons la valeur du temps actuel t suivant la relation :

$$r = \int_0^t P1(t') dt' = 1 - \exp\left(-\frac{t}{Tm}\right)$$

Tm : temps moyen de vol

Et donc :

$$t = -Tm \ln(1 - r) \text{ ou bien } t = -Tm \ln(r)$$

3.2.1 L'algorithme³

1. Mettre l'horloge de simulation à zéro: $hor = 0$
2. Etablissement de la liste des événements : On initialise un compteur d'événements $nbrevent = 0$ et le libre temps de vol Tm de chaque particule i
 - 2.1. Détermination des dates d'occurrences des événements $inst(i), i = 1, nbrevent$

Tirage aléatoire r

$$inst(i) = t \text{ tel que : } t = -Tm \log(r)$$
 - 2.2. Calcul de la vitesse et de la trajectoire de chaque particule i

$$dt = inst(i)$$
 - 2.3. Calcul de l'énergie de chaque particule
 - 2.4. Ordonnancement des événements suivant les dates d'occurrence des collisions
3. Réinitialisation du paramètre $event = 1$
4. Exécution l'événement:
 - 1.1. Type de la collision
 - Elastique et excitation
 - Attachement
 - Ionisation
 - 1.2. Détermination des paramètres de l'électron après la collision (vitesses, énergie et position)
 - 1.3. Calcul de la date d'occurrence de la prochaine collision de l'électron primaire s'il n'est pas attaché et de l'électron éjecté s'il s'agit de l'ionisation :

$$inst(event) = t$$

$$t = hor - \log(r)$$
 - 1.4. Calcul de la vitesse et de la trajectoire de la particule

$$dt = inst(i) - hor$$

Si $z(i) > z_{max}$ ou bien $en_0 = 0$ alors

$$N_e = N_e - 1$$

Fin si

$$en_0 = en - eEdz$$
5. Actualisation des instants d'occurrences des événements

$$hor = inst(event)$$
6. Mise à jour les données (Liste des événements, tableau des vitesses et tableau des positions)
7. Evaluation du critère d'arrêt

$$\bar{\alpha}d \approx 18$$

Si le critère est vérifié alors arrêter
si non aller à 3.

³ Pour plus de détails, voir l'annexe 3

3.3 Calcul des paramètres électriques et physique de la décharge

Pendant les collisions successives des électrons et des particules, certaines valeurs (l'énergie de l'électron, sa position, le nombre d'ions positifs et négatifs, etc.) sont stockées afin de calculer les paramètres physique de la décharge électrique (taux d'ionisation, taux d'attachement, vitesse de dérive et énergie cinétique moyenne). En prenant la moyenne des positions \bar{z} , on peut déterminer les paramètres de transport et les paramètres des particules chargées explicités ci-après [Liu 95].

$$\bar{z} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z(i) \quad (\text{IV.23})$$

3.3.1 Les paramètres physique

Nous obtenons la vitesse de dérive v_d à un temps t est obtenue de la relation suivante :

$$v_d = \frac{\bar{z}}{t} \quad (\text{IV.24})$$

L'énergie cinétique moyenne

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \varepsilon(i) \quad (\text{IV.25})$$

Nous calculons le coefficient d'ionisation α qui est donné par :

$$\alpha = \frac{\ln[(N_{pion}/n_0) + 1]}{\bar{z}} \quad (\text{IV.26})$$

Et le coefficient d'attachement η est donné par

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta = \frac{N_{nion}}{n_0} \frac{1}{\bar{z}} \text{ (si } \alpha = 0) \\ \eta = \frac{N_{nion}}{N_{pion}} \alpha \end{array} \right. \quad (\text{IV.27})$$

Où :

n_0 est le nombre d'électrons initiaux, N_{pion} et N_{nion} sont, respectivement, le nombre d'ions positifs et le nombre d'ions négatifs (compteurs).

3.3.2 La répartition du champ de charges d'espace

La variation du champ électrique dans une cellule élémentaire du domaine d'étude (la $k^{ième}$) ΔE_k dépend du nombre de charge dans cette cellule. Elle est donnée par [Jia 94] :

$$\Delta E_k = \frac{1}{\epsilon_0} (-q_{ek} + q_{pk} - q_{nk}) \quad (\text{IV.28})$$

q_{ek} , q_{pk} , q_{nk} : charges aux sommets de la cellule

Le champ de charges d'espace dans la $k^{ième}$ cellule est :

$$E_k = E_{k-1} + \frac{1}{2} (\Delta E_{k-1} + \Delta E_k) \quad (\text{IV.29})$$

Le champ dans la 1^{ière} cellule est :

$$E_1 = E_c + \frac{1}{2} \Delta E_1 \quad (\text{IV.30})$$

Où E_c est Le champ à la cathode.

Comme les charges d'espace ne produisent pas de tension externe dans l'intervalle inter-électrodes, alors:

$$\int_0^d E dl = 0$$

or

$$\sum_{k=1}^M E_k \Delta Z = 0 \quad (\text{IV.31})$$

En remplaçant les équations (IV.27) et (IV.28) dans l'équation ((IV.29), on trouve :

$$E_c = -\frac{1}{d} \left[\sum_{k=1}^M \Delta Z (M - k + 0.5) \Delta E_k \right] \quad (\text{IV.32})$$

4 Analyse et discussion des résultats

Rappelons que le recours à la SMC nécessite l'usage des programmes informatiques. Dans ce contexte, nous avons réalisé deux programmes FORTRAN qui permettent de simuler les historiques d'un grand nombre d'électrons sous différentes contraintes (tension appliquée et pression).

Grâce aux moyennes sur ces historiques et en utilisant des lois d'échantillonnage, nous avons estimé :

- la distribution temporelle des coefficients d'ionisation et d'attachement, vitesse de dérive et l'énergie moyenne de chaque particule du gaz,
- les distributions spatiales des électrons, des ions positifs et des ions négatifs,
- la distribution du champ électrique par résolution de l'équation de poisson.

Ces différentes estimations ont été évaluées (leurs ordres de grandeurs) suivant le nombre d'historiques réalisées.

4.1 Effet du nombre d'historiques

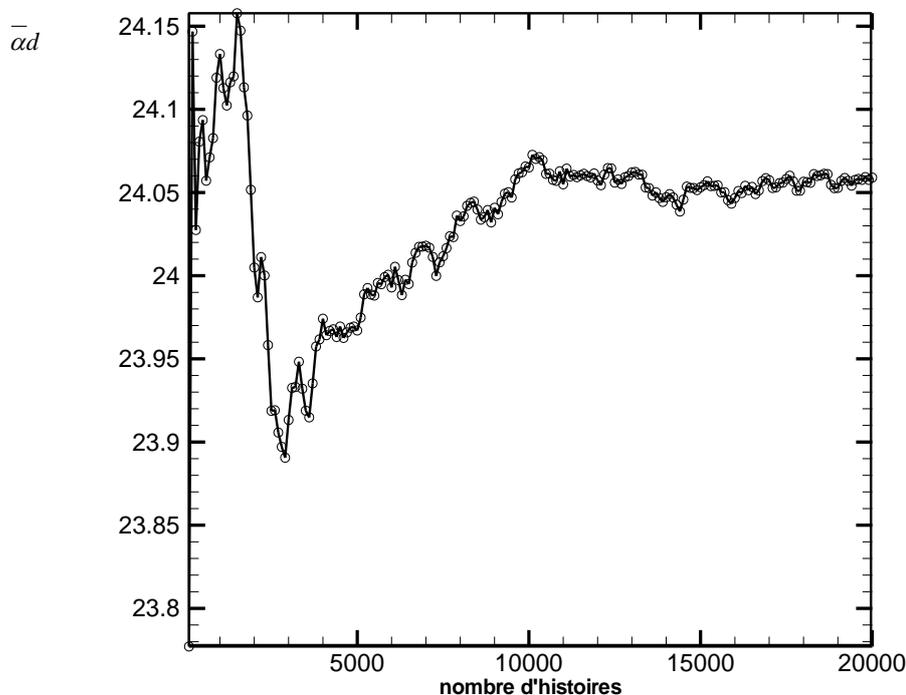


Figure IV.1 : Variation en fonction du nombre d'historiques (pas constant).

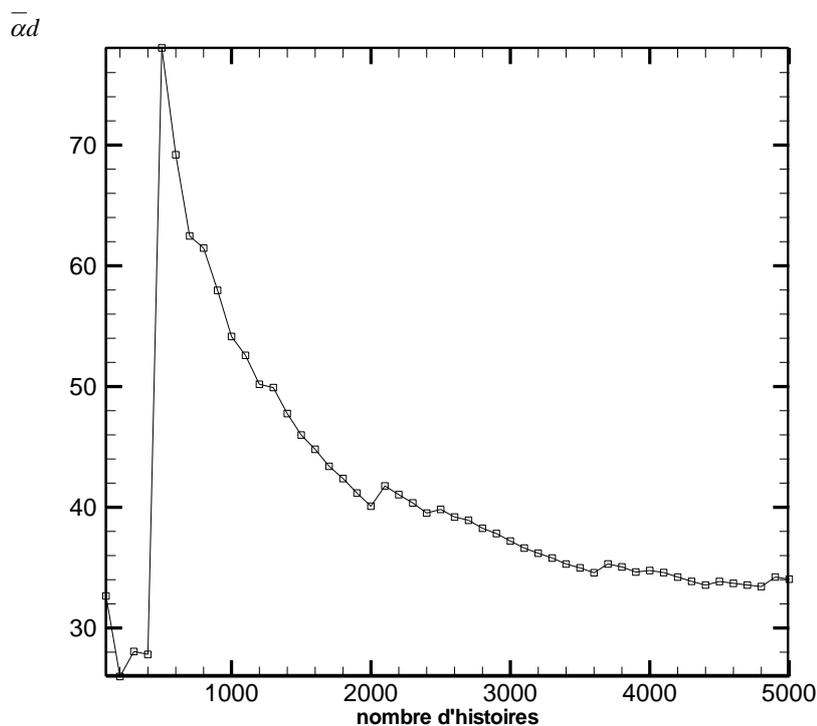


Figure IV.2 : Variation en fonction du nombre d'histoires (pas variable).

L'examen des deux courbes ci-dessus montre que la variation de $\bar{\alpha}d$ en fonction du nombre d'histoires commence à se stabiliser après 10000 histoires pour la simulation à pas constant tandis que cette stabilisation commence à se manifester à partir de 4000 histoires pour ce qu'est de la simulation à pas variables d'où le choix de la méthode à pas variable est convenable pour notre étude.

4.2 Effet de la pression sur le développement de la décharge électrique

Les figures (IV.3, IV.4, IV.5 et IV.6) représentent, respectivement, la variation en fonction du temps des taux d'ionisation, d'attachement, de la vitesse de dérive et de l'énergie cinétique moyenne pour le gaz d'oxygène O_2 à une pression de 1 torr, une température de 293°K (20°C).

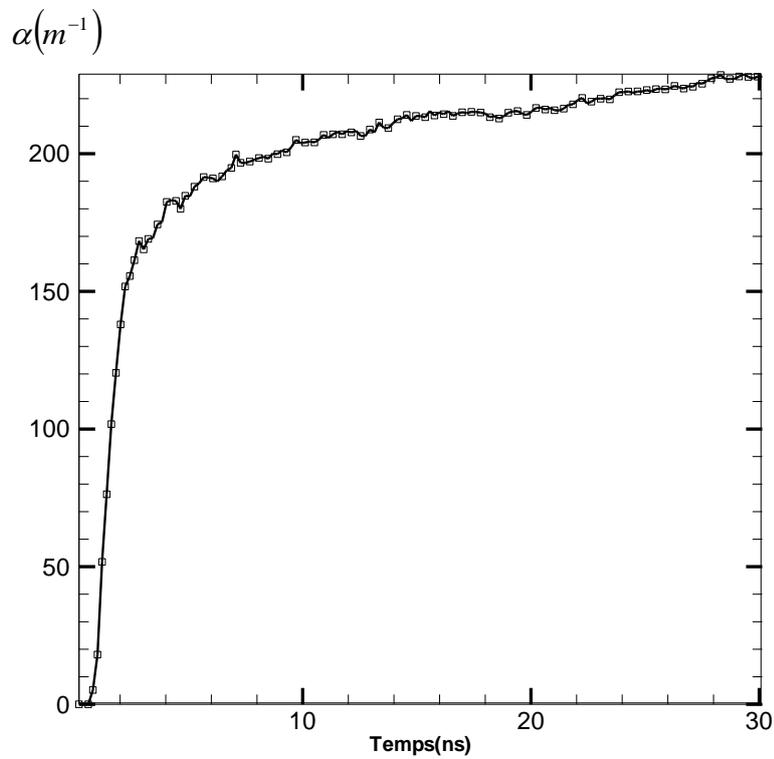


Figure IV.3: Variation temporelle du taux d'ionisation ($p=1\text{torr}$, $V=263.7\text{v}$)

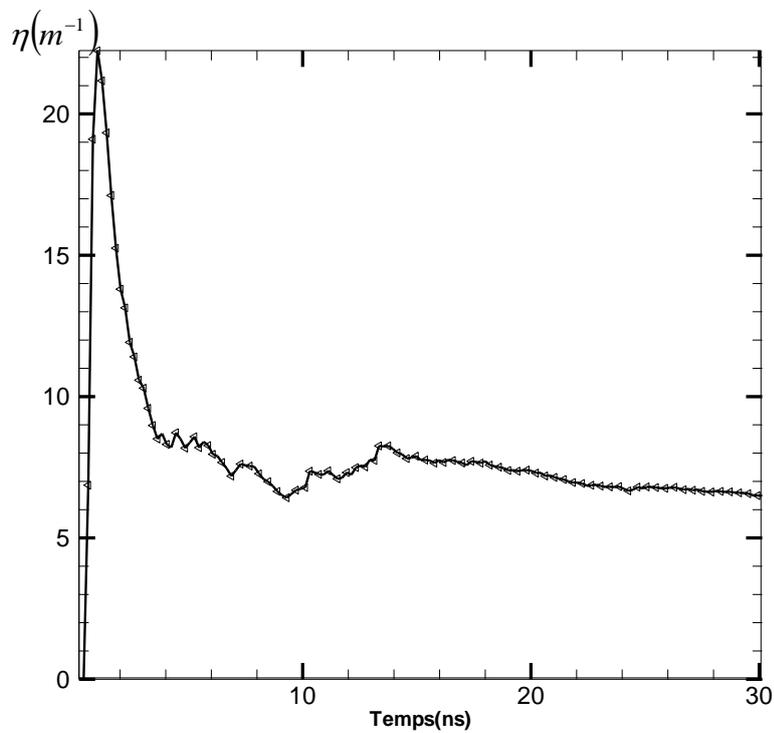


Figure IV.4: Variation temporelle du taux d'attachement ($p=1\text{torr}$, $V=263.7\text{v}$)

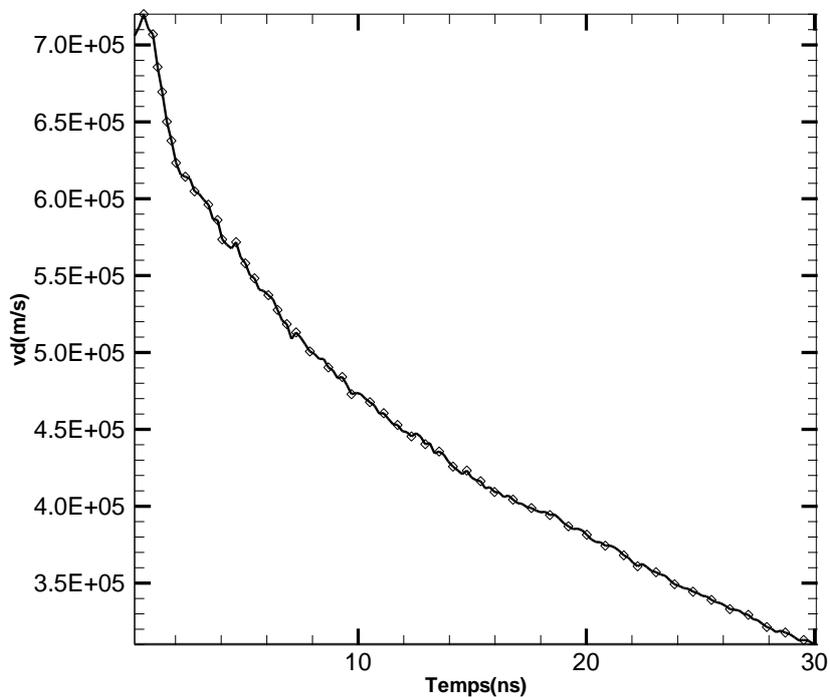


Figure IV.5: Variation temporelle de la vitesse de dérive ($p=1\text{torr}$, $V=263.7\text{v}$)

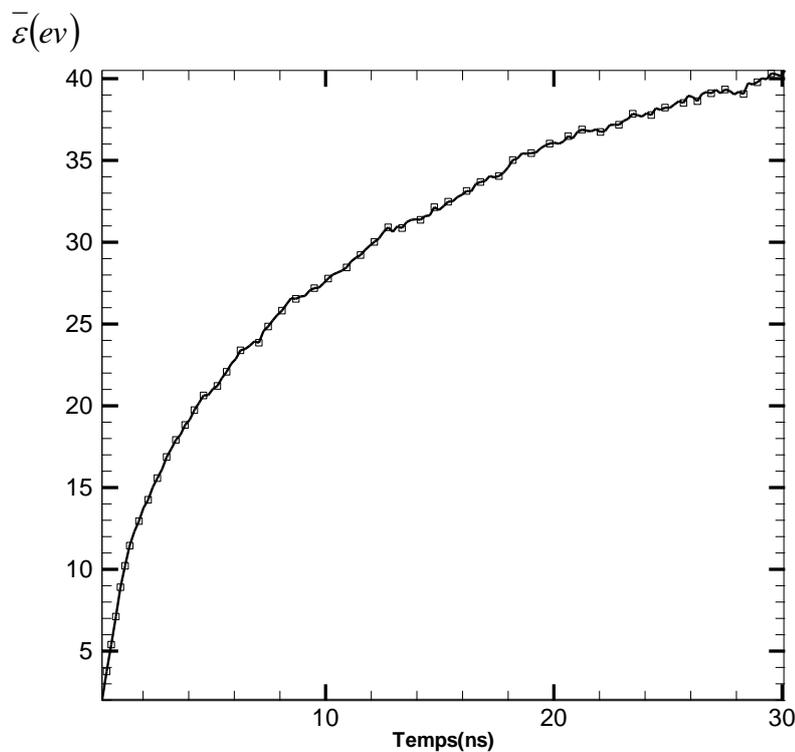


Figure IV.6: Variation temporelle de l'énergie moyenne ($p=1\text{torr}$, $V=263.7\text{v}$)

Les électrons sont accélérés par le champ électrique, ils acquièrent suffisamment d'énergie, sous l'effet de la force électrique $-eE$, pour provoquer l'ionisation lors de leurs collisions avec les molécules du gaz rencontrées dans leur chemin. Comme l'énergie cinétique moyenne croît avec le temps (figure (IV.5)), la probabilité d'ionisation augmente et par conséquent le coefficient d'ionisation α augmente figure (IV.2).

De la figure (IV.5) on constate que la vitesse de dérive diminue avec le temps, cela veut dire que les électrons cèdent leur énergie après un certain nombre de collisions.

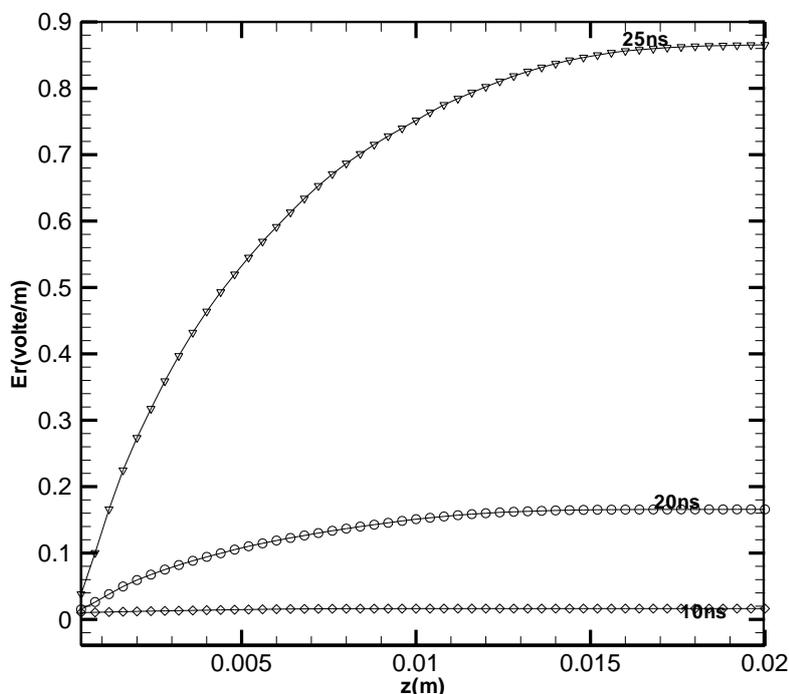


Figure IV.7 : Distribution spatiale du champ de charges d'espace à différents instants de la décharge.

Nous voyons dans la figure (IV. 7) que le champ de charges d'espace croît en fonction du temps mais ses valeurs restent faibles devant le champ appliqué (13.18kv/m) pour une tension appliquée de 263.7v, nous indiquons que le temps de la décharge globale est de 30ns.

Les figures (IV.8, IV.9 et IV.10) représentent, respectivement, la variation avec le temps des taux d'ionisation, d'attachement et de l'énergie moyenne pour le gaz d'oxygène O_2 à une pression de 1 atm sous 57kv et une température de 293°K (20°C). Autant que la charge d'espace s'accumule dans le temps le champ induit croît.

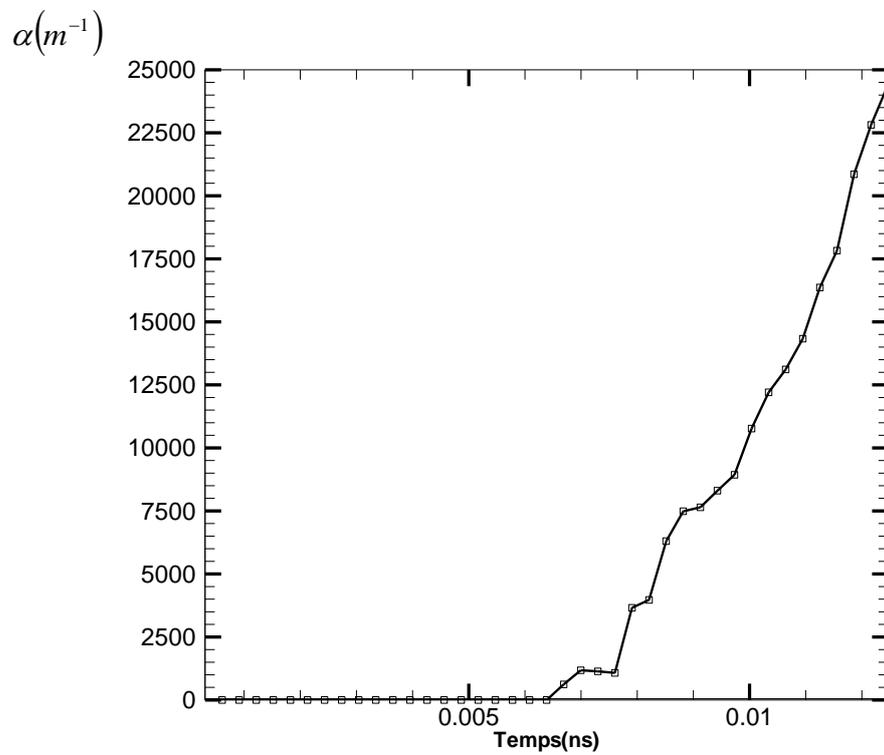


Figure IV.8: Variation temporelle du taux d'ionisation (p=1atm, v=57kv)

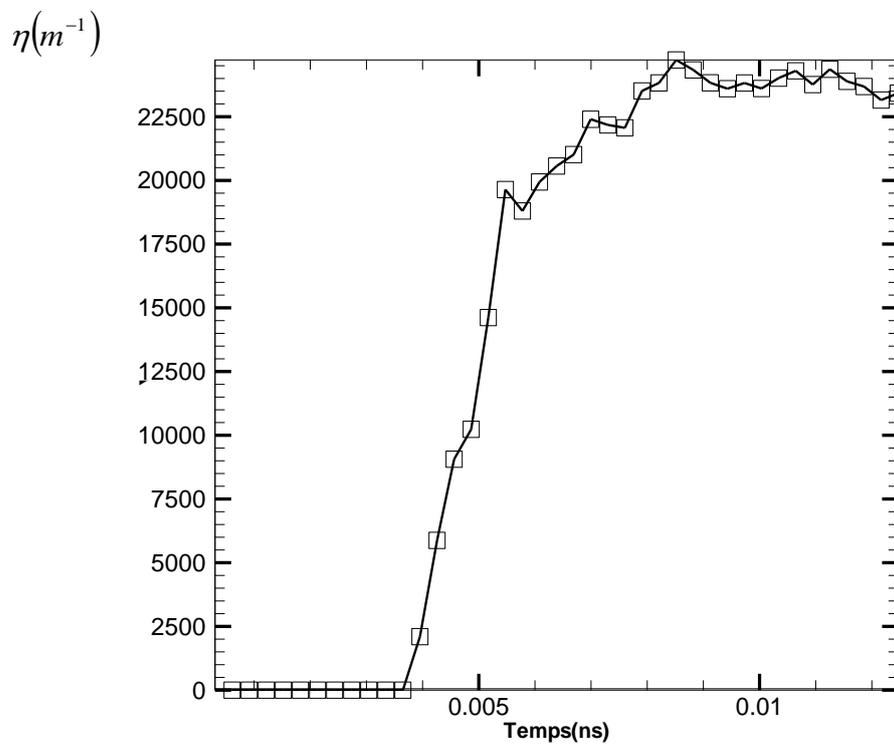


Figure IV.9: Variation temporelle du taux d'attachement (p=1atm, v=57kv)

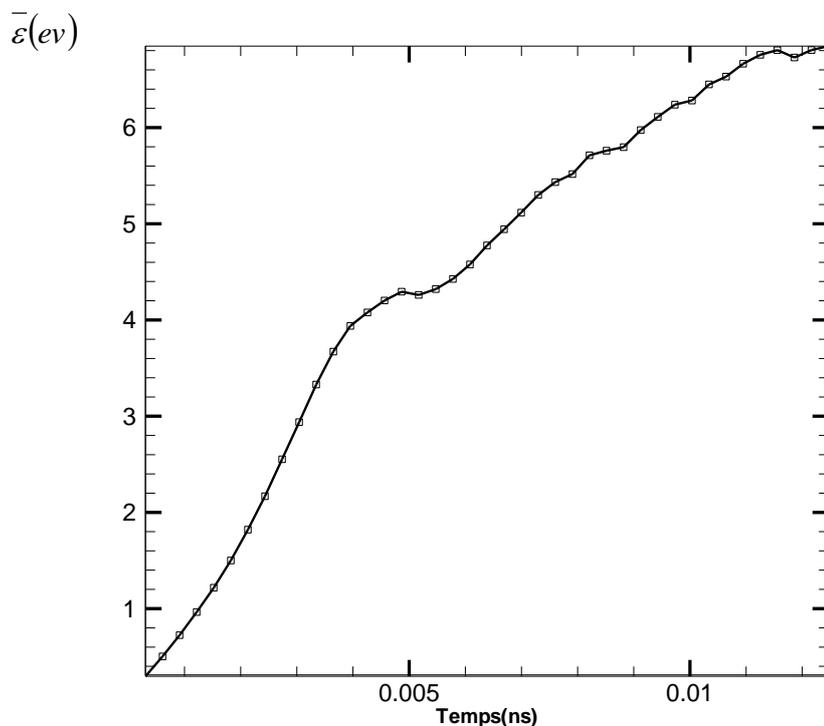


Figure IV.10: Variation temporelle de l'énergie moyenne ($p=1\text{atm}$, $v=57\text{kv}$)

Dans les (figures IV.8 et IV.9), nous remarquons que le taux d'ionisation dans le cas de la pression atmosphérique augmente et atteint de grandes valeurs dans un délai court et que les électrons dans le début de la décharge sont attachés parce qu'ils ont initialement des énergies faibles et le taux d'attachement augmente puis se stabilise à une certaine valeur.

La figure (IV.10) montre que les électrons ont des libres parcours courts (intervalle de 2cm) et comme le gain de l'énergie dépend de la distance parcourue, l'énergie cinétique moyenne des électrons ne varie pas de manière considérable.

4.3 Effet de la tension

Pour mieux comprendre le développement d'une décharge électrique sous l'effet de la tension appliquée, nous avons suivi la variation des paramètres macroscopiques pour différentes valeurs de la tension allant de (50 à 300 V) pour le gaz d'oxygène O₂ à une pression de 1 torr, une température de 293°K (20°C).

Obtenues par la SMC, les valeurs des coefficients macroscopiques suivants : le taux d'ionisation α , le taux d'attachement η , la vitesse de dérive v_d et l'énergie moyenne $\bar{\varepsilon}$ sont rassemblées dans le tableau ci-dessous

Tableau IV.1: Valeurs des coefficients macroscopiques pour différentes valeurs de la tension appliquée

$V(V)$	$\alpha(m^{-1})$	$\eta(m^{-1})$	$v_d(ms^{-1})$	$\bar{\varepsilon}(ev)$
50	1.20	7.13	223610.7	6.22
100	23.70	6.60	253365.3	8.28
150	82.04	6.14	484688.3	13.40
190	91.16	4.78	488064.3	21.25
300	151.06	8.26E-01	535939.4	28.79

Du tableau (IV.1), on peut remarquer qu'en augmentant le champ électrique l'énergie cinétique moyenne augmente et par conséquent, nous avons une augmentation de la probabilité d'ionisation et de la vitesse de dérive. Par contre, la probabilité d'attachement diminue ce qui justifie la décroissance du taux d'attachement.

4.4 Vérification du critère du claquage pour différentes pressions

Les décharges électriques dans les gaz sont de deux types (1) non autonome, (2) autonome. Le claquage dans un gaz est la transition de (1) en (2). La construction des courants dans le claquage est due au processus d'ionisation dans lesquels les paires électron-ion sont créés par collision avec les atomes neutres et leur migration vers l'anode et la cathode.

Pour différentes pressions et différentes tensions avec une distance inter-électrodes de 2cm. Les valeurs de α , η et de $\overline{\alpha d}$ sont collectées dans le tableau ci-dessous :

Tableau IV.2 : Effet du champ électrique réduit et de la pression

P	$V(v)$	α	η	$\overline{\alpha d}$
1 torr	10	0.00	4.68E-01	-9.37E-03
	200	116.46	4.845873	2.23
	600	412.38	9.65E-01	8.22
1atm	40000	737.36	2825.32	-41.76
	50000	3108.40	2679.79	8.57
	55000	26693.99	25623.02	21.41
5atm	2000	0.00	0.00	0.00
	20000	0.00	5.11E-02	-1.02E-03
	60000	0.00	91.477350	-1.80

Le tableau (IV.2) suscite les remarques suivantes :

- pour les tensions 10, 40000, 20000 et 60000 volts, qui correspondent, respectivement, aux pressions 1torr, 1 et 5atm, les valeurs de $\overline{\alpha d}$ sont négatives ($\alpha < \eta$ pas d'ionisation effective),
- pour les tensions de 200 et 50000 volts, qui correspondent, respectivement, aux pressions 1torr, 1 et 5atm, les valeurs de $\overline{\alpha d}$ sont positives mais petites

car il y a des collisions ionisantes entre les électrons et les molécules mais ne sont pas suffisante pour que la décharge se maintienne,

- enfin, pour 1 torr et sous 600 volts nous avons une décharge autonome de Townsend et pour 1atm sous 55000 volts; le critère du claquage par streamer est vérifié.

4.5 Validation

Dans la figure (IV.11) nous représentons les valeurs de α/N en fonction de E/N comparées avec les valeurs de la littérature [GRa 03]

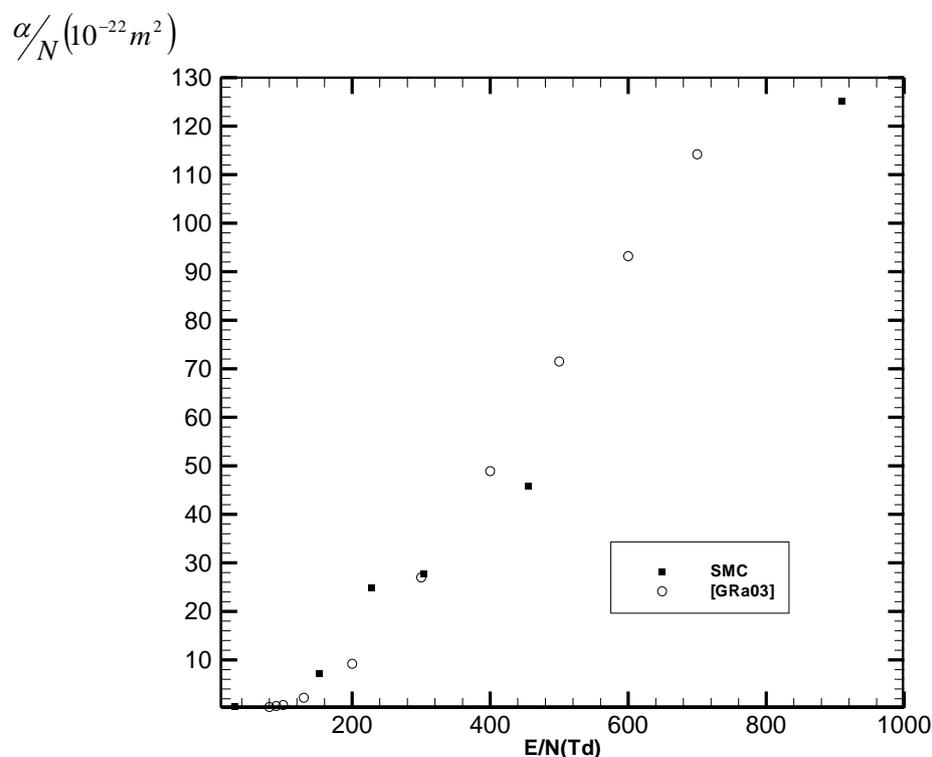


Figure IV.11 : Variation du taux d'ionisation réduit en fonction du champ électrique réduit

Nous remarquons que les valeurs que nous avons obtenues par la SMC sont en bon accord avec celles de la littérature pour des champs électriques réduits (rapport du champ électrique et de la densité du gaz) allant de (0 à 400Td).

5 Conclusion

En conclusion de ce chapitre, notre premier constat montre que le nombre d'histoires influe beaucoup sur les résultats de la simulation : la précision est d'autant meilleure que le nombre d'histoires est important.

A l'opposé de ce constat bien connu, un nombre important d'histoires signifie automatiquement un temps d'exécution de la simulation trop grand d'où la nécessité d'opter pour un compromis : « précision des résultats obtenus pour un temps d'exécution raisonnable ». C'est ce compromis que nous avons pratiqué dans cette application dont les résultats montrent que la variation des paramètres macroscopiques d'une décharge électrique dépend de la pression du gaz (c.à.d. du libre parcours moyen des électrons dans ce gaz).

En effet, si la tension est suffisamment haute, l'ionisation augmente et le gaz devient conducteur et le courant qui le traverse croît d'où l'apparition du claquage. A ce propos, nous avons vérifié les critères du claquage électrique (Townsend pour les basses pressions et streamer pour les hautes pressions).

Bibliographie du Chapitre VI

- [Ama 05] A. AISSANI, (2005). *Modélisation et Simulation*. Alger: Office des Publication Universitaire.
- [Abd 99] A. Settaouti and A. Mimouni. (1999). *Simulation of avalanche growth in gases in uniform electric fields*. guelma.
- [ASe 07] A. Settaouti and L. Settaouti. (2007). *Monte Carlo simulation of electron swarm parameters in O₂*. Eur. Phys. J. Appl. Phys. 37 , 335–341.
- [ASe 073] A. Settaouti, L. Settaouti. (2007). *Numerical simulation of corona discharge in N₂*. Journal of Electrostatics (65), 625–630.
- [Ben 03] B. Djillali et B. Bachir. (2003). *Etude d'une décharge luminescente continue dans l'argon Par la méthode de Monte Carlo*. CNHT'2003 – 5ème Conférence sur la Haute Tension – USTMB, (pp. 61-66). oran.
- [GRa 03] G. G. Raju. (2003). *Dielectrics in Electric Fields* (Power Engineering, 19) (1st edition ed.). New York: CRC Press.
- [HNK 79] H. N. Kicikarpaci and J Lucas. (1979). *Simulation of electron swarm parameters in carbon dioxide and nitrogen for high E/N*. J. Phys. D: Appl. Phys. , vol. 12, 2123-2138.
- [Jia 94] J. Liu and G. R. Govinda Raju. (1994). *Simulation of Corona Discharge Positive Corona in SF₆*. *IEEE transactions on Dielectrics and Electrical Insulation, Vol. 1 No. 3*, pp. 530-537. canada.
- [Liu 95] G. R. Govinda Raju and J. Liu. (1995, October 5). *Simulation of Electrical Discharges in Gases Uniform Electric Fields*. *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation* , 2 (5), pp. 1004-1015.
- [Phe 05] A. V. Phelps, (2005, may 20). *Atomic & Molecular Physics*. Retrieved from JILA NITCU: http://jilawww.colorado.edu/~avp/collision_data/readme.txt

Conclusion générale

1 Travail achevé

Le but de ce mémoire était d'utiliser la Simulation Monte Carlo pour l'étude d'une décharge électrique en calculant ses différents paramètres physiques et électriques.

La recherche bibliographique sur les décharges électriques dans les petits intervalles nous a permis de voir que l'évolution du claquage électrique est caractérisée par deux mécanismes fondamentaux : collision de Townsend et l'évolution des avalanches électriques (Streamers) qui expliquent le claquage sous différentes conditions (pression, température, champ, nature des surfaces des électrodes...).

Nous avons vu que les processus fondamentaux dans une décharge électrique ont une nature aléatoire qui peut être décrite par la Simulation Monte Carlo. Le déroulement de la simulation a été décrit en détaillant les étapes principales qui sont :

- *la description probabiliste* qui consiste à créer un modèle statistique représentant un système complexe ou supportant un phénomène,
- *la génération des variables aléatoires* uniformément distribuées sur $[0,1]$ moyennant un générateur de variables aléatoire,
- l'exploitation des tirages de nombres aléatoires en fonction de description probabilistes pour élaboration des *lois d'échantillonnage*.

Cette méthodologie a été appliquée, dans un premier temps, pour la résolution d'une équation de poisson. C'est ce qui nous a permis, dans un deuxième temps, de l'utiliser pour suivre les historiques des électrons durant la décharge électrique et par conséquent de calculer quelques paramètres physiques tels que les coefficients d'ionisation et d'attachement, la vitesse de dérive et l'énergie moyenne.

Parmi les résultats obtenus de cette application, nous citons l'augmentation du taux d'ionisation et de l'énergie cinétique moyenne suivant la loi exponentielle au fur et à mesure que les électrons avancent dans la direction du champ. Par contre, le taux d'attachement et la vitesse de dérives ont connu des diminutions.

Par ailleurs, il est important de signaler que l'usage de la Simulation Monte Carlo nous a permis d'obtenir des densités de distribution des électrons, des ions positifs et des ions négatifs que nous avons utilisés pour résoudre les équations de Maxwell. Pour rappel, la résolution de ces équations nous permet de déterminer la distribution du champ électrique dans l'intervalle inter-électrodes. Ce dernier est l'une des valeurs principales sur lesquelles se repose tout le calcul des paramètres des décharges électriques quelque soit son type.

2 Difficultés rencontrées

Les difficultés rencontrées durant l'élaboration de notre programme de simulation étaient sur trois niveaux :

- d'abord, l'apparition des charges d'espace rend le champ électrique non uniforme, et l'accélération ne demeure pas constante (ce que nous n'avons pas pu prendre en considération).
- puis, avoir des valeurs plus précises des paramètres électriques et physiques d'une décharge exige plusieurs histoires ce qui rend le temps de simulation trop prohibitif,
- enfin, le manque de bases de données sur les sections efficaces de collisions ion-métal nous a imposé de limiter notre étude au suivi des électrons et de négliger les émissions secondaires qui ont un effet notable sur le déroulement de la décharge.

3 Perspectives envisageables

Le travail accompli devrait être considéré comme une première ébauche de l'usage de la Simulation Monte Carlo pour suivre les historiques des électrons durant la décharge électrique dans un gaz. D'autres aspects peuvent faire l'objet de développements futurs. C'est le cas, par exemple :

- de l'analyse de sensibilité des données qui peuvent être entachées d'incertitudes,
- d'agrandir la distance inter-électrode,
- de prendre les forces d'accélération en considération,
- de suivre le mouvement des ions positifs.

Enfin, une autre piste s'annonce prometteuse pour la suite de notre travail. Il s'agit d'une **Hybridation Monte Carlo - Modèle Fluide** que nous souhaitons aborder dans de futures occasions.

Annexes

Aannexe 1 : L'expérience du compte de Buffon

Aannexe2 : Organigramme de la Simulation Monte Carlo (version à pas constant)

Aannexe 3 : Programme de la SIMulation du Comportement des Electrons dans une Décharge Electrique (version à pas variable)

L'expérience du compte de Buffon

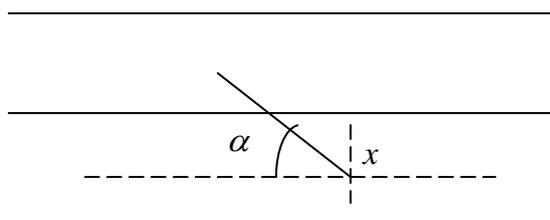
- Le comte de Buffon (1707-1788) est connu essentiellement pour son œuvre de naturaliste.
- On considère un plan (XOY) hachuré de droites parallèles à l'axe OX distantes d'une longueur L .
- Vers 1777 il imagine l'expérience suivante : Il a jeté des aiguilles sur le plan puis, il a comptabilisé le nombre de fois où les aiguilles sont tombées à cheval sur l'une des parallèles.

Modélisation à l'aide de la fonction sinus

Le nombre Pi se retrouve dans la probabilité qu'une aiguille coupe l'une des parallèles

- Supposons la longueur l de l'aiguille inférieure à l'écart a entre deux lignes L

Si on appelle x la plus courte des distances entre le centre de l'aiguille et l'une des droites, et θ l'angle fait par l'aiguille et la verticale, x et θ sont des variables indépendantes.



Expérience de Buffon

L'évènement $A = \ll$ aiguille coupe l'une des parallèles \gg est vérifié lorsque :

$$x \leq l \sin(\theta)$$

- Tous les couples possibles forment un rectangle de largeur π , de hauteur L .

Tous les couples favorables à l'intersection sont sous la courbe. La probabilité d'intersection est le quotient de l'aire sous la courbe, déterminée avec une intégrale, par l'aire du rectangle.

$$P(A) = \frac{S(A)}{s}$$

$$\text{Tel que : } s = \pi L \text{ et } S(A) = \int_0^{\pi} l \sin(\theta) d\theta$$

Cette situation, envisagée par Buffon, met en scène une loi de probabilité continue, déterminée avec une intégrale

Génération des variables aléatoires

Obtenir un échantillon de taille n de couples aléatoires (x, θ) , x et θ suivent la loi d'échantillonnage uniforme :

$$y = a + (b - a)U$$

- Pour la distance x : $a = 0$ et $b = l$.
- Pour l'angle θ : $a = 0$ et $b = \pi$.

Elaboration des lois d'échantillonnage

En vertu de la loi des grand nombres, la probabilité $P(A)$ peut être approchée par la fréquence relative de l'évènement A et :

$$P(A) = \frac{n(A)}{n}$$

$n(A)$: est le nombre de fois où l'aiguille coupe l'une des parallèles

La valeur de π peut être déduite de la formule approximative :

$$\pi = \frac{2l}{L} \frac{n}{n(A)}$$

Algorithme Buffon

$$U(i) = \text{random_number}(r), i = 1, n$$

Faire $i = 1, n$

$$x(i) = l * U(i)$$

$$teta(i) = pi * U(i)$$

$$cond = l \sin(teta(i))$$

Si $(x(i) \leq cond)$ alors

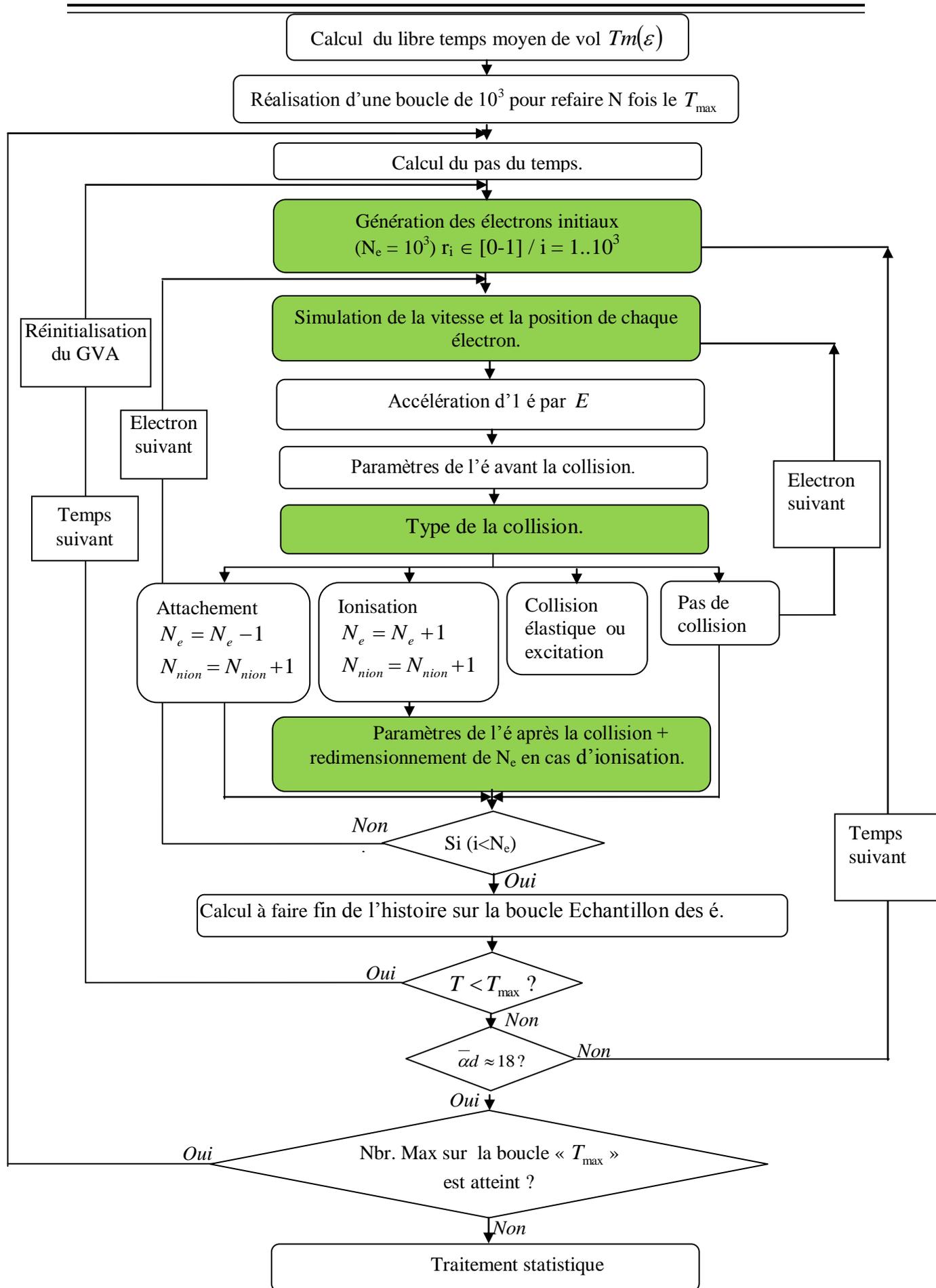
$$nA = nA + 1$$

Fin si

Fin

$$pi = \frac{2l}{L} \frac{n}{nA}$$

Fin algorithme



Organigramme de la Simulation Monte Carlo (version à pas constant)

Programme de la SIMulation du Comportement des Electrons dans une Décharge Electrique (version à pas variable)

```

program SIMCEDE (version à pas variable)
use monte
implicit none
do his=1, 1000
!Horloge de simulation est mise à zéro
hor=0
!liste des événements
!!calcul du temps moyen de vol
  N=(ley*pre*press)/temper
  v=sqrt(2*ener0*(ech/electm))
  Tm0=1/(N*qtot*1E-20*v)
  call random_seed()
do i=kmin,numb
  call random_number(r)
  rsimul(i)=r
  t=-(Tm0*log(1-rsimul(i)))
  inst(i)=t
end do
!Ordonnement
do i=1, numb-1
  nn=i+1
  do j=nn, numb
    if (inst(i)>inst(j)) then
      temp =inst(i)
      tempr =rsimul(i)
      inst(i) =inst(j)
      rsimul(i) =rsimul(j)
      inst(j)=temp
      rsimul(j)=tempr
    end if
  end do
end do
cham=tens/zmax
a=(ech/electm)*cham
do k=kmin, numb
  en(k)=ener0
  dt= inst(k)-hor
  call vitesse(k)
  z0(k)=0
  !!!accélération de électron
  call acceleration(k, a, dt, dz)
  if(z(k)<0.or.z(k)>zmax) then
    Nee=Nee-1
  end if
  en0(k)=en(k)+cham*dz

```

end do

```

do while(numb> Nee)
    do m=kmin, numb
        if(z(m)<0.or.z(m)>zmax)then

            do l=m, numb
                en0(l)=en0(l+1)
                z(l)=z(l+1)
                x(l)=x(l+1)
                y(l)=y(l+1)
                inst(l)=inst(l+1)
                rsimul(l)=rsimul(l+1)

            end do
            en0(numb)=0
            z(numb)=0
            x(numb)=0
            y(numb)=0
            inst(numb)=0
            rsimul(numb)=0
            numb=numb-1

        end if
    end do
end do
#####"boucle principale de la simulation"#####
do while( Nee>0.and. cond<crit)
!Choisir l'événement le plus récent et avancement de l'orloge
event=1
!collision ?
    ancien=rsimul(event)
    call random_number(r)
    rsimul(event)=r
    call croissant( event)
    call probability(event, rsimul, los)
        hor=inst(event)
    call typedecollision(N, ancien, event, numb,los, hor )
    call parametremacro(N0, hor, alpha, eta, enbar, vd, zbar, sommeen, sommez, nbrevent)
!Mise à jour les données

    v=sqrt(2*en(event)*(ech/elec))
    Tm0=1/(N*qtot*1E-20*v)
inst(event)=hor-(Tm0*log(1-rsimul(event)))
    z0(event)=z(event)
    x0(event)=x(event)
    y0(event)=y(event)

```

```

dt= inst(event)-hor
  call vitesse(event)
  !!!accélération de électron
  call acceleration(event, a, dt, dz)

  if(en0(event)==0.or.(z(event)<0.or.z(event)>zmax)) then
    Nee=Nee-1
    !write(*,*) 'z('k,')=', z(k), 'Nee=', Nee
  end if
  en0(event)=en(event)+cham*dz
  do while(numb> Nee)
    !write(*,*) 'Nee=', Nee      , 'numb=', numb
    do m=kmin, numb
      if((en0(event)==0).or.(z(event)<0.or.z(event)>zmax))
then
        do l=m, numb
          en0(l)=en0(l+1)
          z(l)=z(l+1)
          x(l)=x(l+1)
          y(l)=y(l+1)
          inst(l)=inst(l+1)
          rsimul(l)=rsimul(l+1)

        end do
        en0(numb)=0
        z(numb)=0
        x(numb)=0
        y(numb)=0
        inst(numb)=0
        rsimul(numb)=0
        numb=numb-1

      end if
    end do
  end do
  !numb=Nee
  call miseajour(kmin, numb)
  do k=kmin, numb
    !write(22,*)k, en(k),en0(k)
  end do
  !Evaluation des critères d'arrêt
  effec=(alpha-eta)/100
  cond=(alpha-eta)*d/100
  !chamr=constr*((effec*exp(cond))/sqrt(d/press))
  !write(22,*)'alpha=', alpha
end do
alphai(his)= alpha
etai(his)= eta

```

```

eni(his)= enbar
vdi(his)= vd
zbari(his)=zbar
effeci(his)=effec
condi(his)=cond

enbar=0
zbar=0
effec=0
cond=0

end do
call traitementstat(alpha, eta, enbar, vd, zbar, effec, cond)
end
module monte
contains
subroutine vitesse(k)
  teta(k)=acos(1-2*rsimul(k))
  phie(k)= 2*pie*rsimul(k)

  v0(k)=sqrt((2*en(k))*(ech/elec))
  vz0(k)=v0(k)*cos(teta(k))
  vx0(k)=v0(k)*sin(teta(k))*cos(phie(k))
  vy0(k)=v0(k)*sin(teta(k))*sin(phie(k))
  z0(k)=z(k)
  x0(k)=x(k)
  y0(k)=y(k)
end subroutine
subroutine acceleration(k, a, dt, dz)
  vz(k)=vz0(k)+a*dt
  vx(k)=vx0(k)
  vy(k)=vy0(k)
  z(k)=z0(k)+(vz(k)*dt)+(a*(dt**2)/2 )
  x(k)=x0(k)+(vx(k)*dt)
  y(k)=y0(k)+(vy(k)*dt)
  dz=abs((vz(k)*dt)+(a*(dt**2)/2 ))
end subroutine
subroutine croissant(event)
  do k=3, 17
    P2(k-2)=q(k, 1)
    loss(k-2)=q(k, 178)
  end do
  do i=1, N-1
    do j=i+1, N
      if (P2(i)>P2(j)) then
        PTemp =P2(i)
        PTemp1 =loss(i)
        P2(i) =P2(j)
        loss(i) =loss(j)
        P2(j)=PTemp
        loss(j)=PTemp1
      end if
    end do
  end do
end subroutine

```

```

                end if
            end do
        end do
    end subroutine
subroutine probability(event, rsimul, los)
do k=1, 15
    if (P2(15)==1) then
        los=loss(15)
    else
        do i=1, 14
            d(i)=P2(i+1)
        end do
        do j=2, 15
            P2(j)=d(j-1)+P2(j-1)
            if(rsimul(event)>P2(j-1).and. rsimul(event)<P2(j)) then
                los=loss(j)
            end if
        end do
    end if
end do
end subroutine

subroutine typedecollision(N, ancien, event, numb, los, hor )
delta=0.04
if (los==0)then
!write(*,*)'on a un attachement'
    Nnion=Nnion+1
    Nee=Nee-1
    en(event)=0
sommeen= sommeen+ en(event)
    sommez= sommez+ z(event)
    do l=event, numb
        en(l)=en(l+1)
        z(l)=z(l+1)
        x(l)=x(l+1)
        y(l)=y(l+1)
        inst(l)=inst(l+1)
        rsimul(l)=rsimul(l+1)
    end do
    en0(numb)=0
        z(numb)=0
        x(numb)=0
        y(numb)=0
        inst(numb)=0
        rsimul(numb)=0
    numb=numb-1
else if (los==1)then
    !write(*,*)'the collision thats occured is elastique '
    teta= acos(1-2*ancien)

```

```

    phie= 2*pie*rsimul(ancien)
    w0=sin(teta)*cos(phie)
    s0=sin(teta)*sin(phie)
    u0=cos(teta)
    teta= acos(1-2*rsimul(event))
    phie= 2*pie*rsimul(event)
    w1=sin(teta)*cos(phie)
    s1=sin(teta)*sin(phie)
    u1=cos(teta)
    xsie=cos((w0*w1) + (s0*s1) + (u0*u1) )
    en(event)=(1-2*const*(1-xsie))*en0(event)
    sommeen= sommeen+ en(event)
  sommez= sommez+ z(event)
else if (los==12.06) then
  !      write(*,*)'on a ionization'
  Npion=Npion+1
  numb=numb+1
  Nee=Nee+1
  ion=numb
  en(event)=rsimul(event)*(en0(event)- los)
  sommeen= sommeen+ en(event)
  sommez= sommez+ z(event)
  call random_number(r)
  rsimul(numb)= r
  en(numb)=(1-rsimul(event))*(en0(event)- los)
  v=sqrt(2*en(numb)*(ech/electm))
  Tm0=1/(N*qtot*1E-20*v)
  inst(ion)=hor-(Tm0*log(rsimul(ion)))
  !write(*,*) 'en(',jjion,')', en(jjion)
  z0(ion)=z(event)
  x0(ion)=x(event)
  y0(ion)=y(event)
  dt=inst(ion)-hor
  call vitesse(ion)
  !!!accélération de électron
  call acceleration(ion, a, dt, dz)
  if(z(ion)<0.or.z(ion)>zmax) then
    Nee=Nee-1
    numb=numb-1
    !write(*,*) 'z(',k,')=', z(k), 'Nee=', Nee
  end if
  en0(ion)=en(ion)+cham*dz
else

  !write(*,*)'on a une excitation'

  en(event)=en0(event)-los
end if
end subroutine

```

```

subroutine miseajour(kmin, numb)
do i=kmin, numb-1
nn=i+1
  do j=nn, numb
    if (inst(i)>inst(j)) then
      temp =inst(i)
      tempz=z0(i)
      tempx=x0(i)
      tempy=y0(i)
      tempen=en(i)
      tempr =rsimul(i)
      inst(i) =inst(j)
      z0(i)=z0(j)
      x0(i)=x0(j)
      y0(i)=y0(j)
      en(i)=en(j)
      rsimul(i) =rsimul(j)
      inst(j)=temp
      z0(j)=tempz
      x0(j)=tempx
      y0(j)= tempy
      rsimul(j)=tempr
      en(j)=tempen
    end if
  end do
end do
end subroutine
subroutine parametremacro(N0, hor, alpha, eta, enbar, vd, zbar, sommeen, sommez, nbrevent)
nbrevent=nbrevent+1
  zbar=sommez/nbrevent
  quau=Npion/N0
  alpha=log(quau+1)/zbar
if (Nnion==0) then
eta=0
else if (alpha==0)then
  eta=(Nnion/N0)*(1/zbar)
else
  eta=(Nnion/Npion)*alpha
end if
  vd=zbar/hor
  enbar=sommeen/nbrevent
end subroutine
subroutine traitementstat(alpha, eta, enbar, vd, zbar, effec, cond)
nomb=1000
do i=1, nomb
  alpha=alpha+ alphai(i)
  eta= eta+etai(i)
  enbar= enbar+ eni(i)
  vd=vd+ vdi(i)

```

```
        zbar=zbar+ zbari(i)
        effec=effec+ effeci(i)
        cond=cond+ condi(i)
    end do
    alpha=alpha/nomb
    eta= eta/nomb
    enbar= enbar/nomb
    vd=vd/nomb
    effec=effec/nomb
    effec=effec*d
    do i=1, nomb
        var=var+((alpha(i))-alpha)**2
    end do
    var=var/ nomb
    write(*,*) var
    ecart=sqrt(var)
    pre=ecart/sqrt(nomb)
write(22,*) alpha, eta, enbar, vd, pre, effec
    end subroutine
end module
```

Abstract

The generation of plasmas and the initiation of electrical breakdown are realized by the phenomena of electrical discharge which is provoked when we apply an electric field in a gas. Consequently the free charges are accelerated, new charged particles are created and others are destructed. This can be ranged in four phenomena: elastic collision (recombination), attachment, excitation and ionization.

In this work we study the electrical discharge in the case of Oxygen O_2 . Monte Carlo Simulation is used to follow the random trajectory of free charges. To determinate the electrical and physical parameters, we have used the sampling law to calculate the ionization and attachment coefficient. The spatial distributions of space charges (electron, positives and negatives ions) are also followed. The determination of electrical field depends on distributions of charged particles obtained by solving the Maxwell equations.

Key words

Electrical discharge, Electrons swarm, Mean free path, Collision cross section, Collision probability, Mean free flight time, Collision energy, Electrical field, Monte Carlo Simulation.

Résumé

La génération et l'entretien des plasmas et l'initiation du claquage électrique se réalisent par décharge électrique. Celle là se manifeste par une application d'un champ électrique sur un gaz où des charges libres sont accélérées, de nouvelles particules chargées peuvent être créées et d'autres détruites où se produit les quatre phénomènes: la collision élastiques, l'attachement, l'excitation et l'ionisation.

Dans notre travail nous avons essayé d'étudier la décharge électrique dans le cas de l'oxygène O_2 . Nous nous sommes orientés vers l'utilisation de la Simulation Monte Carlo pour suivre les trajectoires aléatoires des charges libres. Pour déterminer les paramètres électriques et physiques d'une décharge, on a utilisé des lois d'échantillonnage pour le calcul des coefficients d'ionisation et d'attachement. Les distributions spatiales des charges d'espace (électrons, ions positifs et ion négatifs) sont aussi suivies. Le champ électrique est calculé en fonction de ces distributions en résolvant les équations de Maxwell.

Mots clés

Décharge électrique, Nuage électronique, Libre parcours moyen, Section efficace de collision, Probabilité de collision, Libre temps moyen de vol, Energie de collision, Champ électrique, Simulation Monte Carlo.