

Chapitre 2: Modélisation mathématique du système

MODELISATION MATHEMATIQUE DU SYSTEME

III-1- position du problème :

Nous nous proposons de simuler l’empreinte thermique d’une décharge électrique dans l’air et d’en déduire les mouvements convectifs, dans cinq profils.

Nous admettons que nous sommes en situation de gaz faiblement ionisé (le degré d’ionisation est inférieur à 10^{-4}), et donc que les processus d’ionisation et recombinaison ne modifient pas de façon significative la densité locale des neutres.

L’air sera considéré comme un gaz mono moléculaire, dont propriétés thermodynamique (capacité calorifique, viscosité, conductivité, etc...) sont des moyennes pondérées de celles de l’Azote et l’Oxygène. On considère également, que le gaz obéit à l’équation d’état des gaz parfaits.

La géométrie de la décharge sera de type ponté-plan (intervalle ≤ 20 mm), et possédant la symétrie de révolution autour de l’axe de la décharge. Ainsi s’impose l’utilisation des coordonnées cylindriques. Le mouvement du gaz au voisinage et au contact des parois, relève des seules propriétés mécaniques (paroi froide,...), à l’exclusion des phénomènes physico-chimiques pouvant influencer sur la nature du gaz. De même, nous vérifierons que les conditions de décharge qui sont les nôtres, la température du gaz reste inférieure à la température de dissociation de l’oxygène (elle-même inférieure à celle l’azote). Etablissons maintenant, la forme générale des

équations de transport de la densité, de la quantité de mouvement, et de l'énergie des particules neutres, à partir de l'équation de Boltzmann.

II-2-Formalisme de la dynamique de la dynamique des gaz neutres :

L'évolution dans l'espace (\vec{r}, \vec{w}) de la formation de distribution des vitesses obéit à l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) + \vec{w} \cdot \vec{\nabla}_r f(\vec{r}, \vec{w}, t) + \frac{\vec{F}}{M} \cdot \vec{\nabla}_w f(\vec{r}, \vec{w}, t) = \left\{ \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right\}_{\text{coll}} \quad (\text{II. 1})$$

Où :

$f(\vec{r}, \vec{w}, t)$ étant la fonction de distribution à une particule des vitesses d'un ensemble de N particules, \vec{w} représente la vitesse particulière $\frac{\vec{F}}{M}$. Représente l'accélération imposée aux particulaires de masse M par les force extérieures. $\vec{\nabla}_r$, représente le gradient dans l'espace des positions. $\vec{\nabla}_w$ représente le gradient dans l'espace des vitesses. $\left\{ \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right\}_{\text{coll}}$ représente le taux de variation de la fonction de distribution du aux collisions.

Au lieu de résoudre l'équation (II.1) en $f(\vec{r}, \vec{w}, t)$, puis prendre les moments de cette fonction pour obtenir les propriétés macroscopique du gaz, on peut dériver à partir de cette équation un ensemble d'équations couplées pour ces moments d'ordres successifs.

Cette propriété macroscopique peut être scalaire, vectorielle ou tensorielle. Nous appellerons $\varphi(\vec{w})$ cette propriété, et nous chercherons l'équation de transport macroscopique de $\varphi(\vec{w})$ cette propriété, et nous chercherons l'équation de transport macroscopique de $\varphi(\vec{w})$ à partir de l'équation (II.1).

II-2-1-Equation de transport de la quantité $\varphi(\vec{w})$:

multiplions l'équation (II.1) par $\varphi(\vec{w})$ et intégrons dans tout l'espace des vitesses :

$$\begin{aligned} \iint_{(w)} \left[\frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) + (\vec{w} \cdot \vec{\nabla}_r f(\vec{r}, \vec{w}, t)) + \left(\frac{\vec{F}}{M} \cdot \vec{\nabla}_w f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right) \right] \varphi(\vec{w}) d^3 w \\ = \iint_w \left\{ \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right\}_{\text{coll}} \varphi(\vec{w}) d^3 w \end{aligned} \quad (\text{II. 2})$$

Pour calculer les trois intégrales du premier membre de l'équation (II. 2) on pose :

$$\begin{aligned} \iint_w \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \varphi(\vec{w}) d^3 w \quad \iint_w (\vec{w}(\vec{r}, t) \cdot \vec{\nabla}_r f(\vec{r}, \vec{w}, t)) \varphi(\vec{w}) d^3 w \quad \iint_w \left(\frac{\vec{F}}{M} \cdot \vec{\nabla}_w f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right) \varphi(\vec{w}) d^3 w \\ \left\{ \begin{aligned} I_1 &= \iint_{(w)} \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \varphi(\vec{w}) d^3 w \\ I_2 &= \iint_{(w)} (\vec{w}(\vec{r}, t) \cdot \vec{\nabla}_r f(\vec{r}, \vec{w}, t)) \varphi(\vec{w}) d^3 w \\ I_3 &= \iint_{(w)} \left(\frac{\vec{F}}{M} \cdot \vec{\nabla}_w f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right) \varphi(\vec{w}) d^3 w \end{aligned} \right. \end{aligned} \quad (\text{II. 3})$$

Si maintenant on définit la valeur moyenne de $\varphi(\vec{w})$ par :

$$\langle \varphi(\vec{w}) \rangle = \frac{1}{N(\vec{r}, t)} \iint_{(w)} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \varphi(\vec{w}) d^3 w \quad (\text{II. 4})$$

On peut alors facilement écrire :

$$\left\{ \begin{aligned} I_1 &= \frac{\partial}{\partial t} \{N(\vec{r}, t) \langle \varphi(\vec{w}) \rangle\} \\ I_2 &= \vec{\nabla}_r \{N(\vec{r}, t) \langle \varphi(\vec{w}) \vec{w}(\vec{r}, t) \rangle\} \\ I_3 &= -\frac{\vec{F}}{M} \{N(\vec{r}, t) \langle \vec{\nabla}_w \varphi(\vec{w}) \rangle\} \end{aligned} \right. \quad (\text{II. 5})$$

En supposant que la force qui agit sur les particules est indépendante de leur vitesse, et que cette dernière est indépendante de la direction :

$$\frac{\partial F_i}{\partial w_i} = 0, \quad \frac{\partial w_i}{\partial x_i} = 0 \quad \text{où } i=1,2,3 \quad (\text{II. 6})$$

Finalement, on remplace les intégrales par leurs valeurs, et l'équation de transport de la propriété φ s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \{N(\vec{r}, t) \langle \varphi(\vec{w}) \rangle\} + \vec{\nabla}_r \{N(\vec{r}, t) \langle \varphi(\vec{w}) \vec{w} \rangle\} - \frac{\vec{F}}{M} \{N(\vec{r}, t) \langle \vec{\nabla}_w \varphi(\vec{w}) \rangle\} \\ = \iiint_{(w)} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right\}_{\text{coll}} \varphi(\vec{w}) d^3w \end{aligned} \quad (\text{II. 7})$$

Cette équation est relative à l'unité de volume du gaz, autour du point repéré par son rayon valeur \vec{r} , et au temps t .

L'évolution de la propriété macroscopique φ , est due :

- Aux flux de particules vers l'antérieur et extérieur de l'élément de volume considéré,
- Aux variations de φ avec les paramètres d'état de chaque particule,
- Aux collisions qui se produisent dans l'élément de volume local. Toute particule venant de l'extérieur de ce volume y dépose l'excédent de la propriété φ qu'elle transporte par rapport à la valeur moyenne de cette propriété dans l'élément de volume considéré.

II-2-1-1-Equation de transport de la densité :

Si on pose dans équation (II. 7) $\varphi(\vec{w}) = 1$ et $\langle \vec{w}(\vec{r}, t) \rangle = V(\vec{r}, t)$, on obtient alors la relation suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t} N(\vec{r}, t) + \vec{\nabla}_r (N(\vec{r}, t) V(\vec{r}, t)) = \iiint_{(w)} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right\}_{\text{coll}} d^3w \quad (\text{II. 8})$$

Dans cette équation $V(\vec{r}, t)$ représente la vitesse moyenne macroscopique de l'ensemble.

II-2-1-2-Equation de transport de la quantité de mouvement :

posons maintenant, $\varphi(\vec{w}) = M\vec{w}$ qui représente la quantité de mouvement d'une particule de masse M et de vitesse \vec{w} , et $\vec{w} = \vec{V} + \vec{a}$ avec \vec{a} la vitesse d'agitation thermique dont la valeur moyenne est nulle ($\langle \vec{a} \rangle = 0$).

l'équation de transport décrira alors l'évolution spatio-temporelle de la vitesse moyenne $V(\vec{r}, t)$, soit:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} MN(\vec{r}, t)V(\vec{r}, t) + \vec{\nabla}_r(N(\vec{r}, t)\langle M\vec{w}(\vec{r}, t) \cdot \vec{w}(\vec{r}, t) \rangle) - \frac{\vec{F}}{M} \{MN(\vec{r}, t)\langle \vec{\nabla}_w \vec{w} \rangle\} \\ = \iiint_{(w)} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right\}_{\text{coll}} M \vec{w} d^3w \end{aligned} \quad (\text{II. 9})$$

avec $M\langle \vec{w} \cdot \vec{w} \rangle$ le tenseur de pression totale (y compris de viscosité), $\vec{\nabla}_w \cdot \vec{w}$ un produit tensoriel dont résultat est le tenseur unité.

Introduction la quantité $\Psi = NM\langle \vec{a} \cdot \vec{a} \rangle$ qui représente le tenseur de la pression cinétique dans l'équation ci-dessus, on obtient alors l'équation de transport de la quantité de mouvement :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} MN(\vec{r}, t)V(\vec{r}, t) + \vec{\nabla}_r(N(\vec{r}, t)M\vec{V}(\vec{r}, t) \cdot \vec{V}(\vec{r}, t) + \Psi) - \frac{\vec{F}}{M} (MN(\vec{r}, t)) \\ = \iiint_{(w)} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right\}_{\text{coll}} M \vec{w} d^3w \end{aligned} \quad (\text{II. 10})$$

II-2-1-3-Equation de transport de d'énergie :

Posons $\varphi(\vec{w}) = \frac{1}{2} Mw^2$ qui représente l'énergie d'une particule de masse M et de vitesse \vec{w} , étant donné que $\vec{\nabla}_w \cdot w^2 = 2\vec{w}$, on obtient immédiatement :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{1}{2} MN(\vec{r}, t) \langle w^2(\vec{r}, t) \rangle \right) + \vec{\nabla}_r (MN(\vec{r}, t) \langle w^2(\vec{r}, t) \vec{w} \rangle) - \left(\frac{\vec{F}}{M} MN(\vec{r}, t) \cdot V(\vec{r}, t) \right) \\ = \iiint_{(w)} \frac{1}{2} MN(\vec{r}, t) w^{2(\vec{r}, t)} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right\}_{\text{coll}} d^3w \end{aligned} \quad (\text{II. 11})$$

On reconnaît dans terme $\left(\frac{\vec{F}}{M} MN(\vec{r}, t) \cdot V(\vec{r}, t) \right)$ la puissance des forces appliquées.

Posons $\vec{w} = \vec{V} + \vec{a}$ pour faire apparaître de façon explicite, d'une part la contribution du mouvement d'ensemble ordonné grâce aux forces extérieures, d'autre part la contribution du mouvement d'ensemble désordonné d'agitation thermique.

On obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(W_{th} + W_c) + \vec{\nabla}_r \left\{ (W_{th} + W_c) \vec{V}(\vec{r}, t) + \frac{1}{2} MN(\vec{r}, t) \langle a^2 \vec{a} \rangle + MN(\vec{r}, t) \langle (\vec{a} \cdot \vec{V}(\vec{r}, t)) \vec{a} \rangle \right\} \\ - \vec{F}N(\vec{r}, t) \cdot \vec{V}(\vec{r}, t) = \iiint_{(w)} \frac{1}{2} MN(\vec{r}, t) w^2(\vec{r}, t) \left\{ \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right\}_{coll} d^3 w \quad (II. 12) \end{aligned}$$

Où : $W_c = \frac{1}{2} MN(\vec{r}, t) V^2(\vec{r}, t)$ l'énergie due à la vitesse d'ensemble (énergie cinétique du gaz),

: $W_{th} = \frac{1}{2} MN(\vec{r}, t) \langle a^2 \rangle$ l'énergie due à la vitesse d'agitation thermique (énergie interne du gaz). On montre facilement que $(\vec{a} \cdot \vec{V}(\vec{r}, t)) \vec{a} = \frac{1}{MN(\vec{r}, t)} (\vec{V}(\vec{r}, t) \Psi)$ et si en plus, on définit le flux d'énergie thermique (ou flux de chaleur) $\vec{Q} = \frac{1}{2} MN(\vec{r}, t) \langle a^2 \vec{a} \rangle$, on peut alors écrire l'équation de transport de l'énergie sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(W_{th} + W_c) + \vec{\nabla}_r \{ (W_{th} + W_c) \vec{V}(\vec{r}, t) \} + \vec{\nabla}_r \vec{Q} + \vec{\nabla}_r (\Psi V(\vec{r}, t)) - \vec{F}N(\vec{r}, t) \cdot \vec{V}(\vec{r}, t) \\ = \iiint_{(w)} \frac{1}{2} MN(\vec{r}, t) w^2(\vec{r}, t) \left\{ \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right\}_{coll} d^3 w \quad (II. 13) \end{aligned}$$

Pour pouvoir exploiter le système d'équations de transport (II.8, II.10, II.13), il faut définir d'autres hypothèses, vu le caractère non linéaire de l'équation de Boltzmann, et l'ouverture du système d'équations. Nous supposons que, le milieu est constamment à l'équilibre thermodynamique sur les échelles de temps considérés, que les inhomogénéités du gaz (densité, température, vitesse) ne sont pas trop fortes, et de ce fait on peut trouver une solution à l'équation de Boltzmann linéarisée. Cette linéarisation s'obtient en supposant qu'en tout point de l'espace, l'état statistique diffère peu de l'état gaussien local, et en traitant l'écart à ce dernier comme un infiniment petit. On obtient alors, les équations classiques de Navier Stokes (J.L.Delcroix [1] et [2]). Pour la fermeture du système d'équations, on induit l'équation d'état des gaz parfaits. Il convient de remarquer que, nous négligeons l'action des forces extérieures, en particulier l'action de la gravité tout à fait négligeable, devant l'intervention des effets de gradients et d'injection d'énergie.

II-2-2- Application au cas d'un gaz de neutres parcouru par une décharge :

II-2-2-1- Equation de conservation de la densité :

Le gaz considéré étant faiblement ionisé, la population des neutres reste invariante et ainsi le terme source de création ou perte de neutres, est nul :

$$\left(\left\{ \frac{\partial}{\partial t} f(\vec{r}, \vec{w}, t) \right\}_{\text{coll}} \right) = 0$$

Si on désigne par $N(r,z,t)$ la densité du gaz par $V(r,z,t)$ sa vitesse moyenne macroscopique l'équation (III.8) s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} N(r, z, t) + \vec{\nabla} \cdot (N(r, z, t) \vec{V}(r, z, t)) = 0 \quad (\text{II. 14})$$

II-2-2-2- Equation de conservation de la quantité de mouvement:

Les seules forces agissantes sur le gaz sont les forces de pression dues au gradient de densité et de température, puisqu'en situation de gaz faiblement ionisé, on néglige le transfert direct de quantité de mouvement engendré par les collisions avec les particules chargées, et on conserve les cisaillements provoqués par les forces de viscosité, on obtient ainsi :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \{MN(r, z, t) \vec{V}(r, z, t)\} + \vec{\nabla} \cdot \{MN(r, z, t) \vec{V}(r, z, t) \vec{V}(r, z, t)\} \\ = -\vec{\nabla} P(r, z, t) - \vec{\nabla} \bar{\Gamma} \end{aligned} \quad (\text{II. 15})$$

P est la pression du gaz, $\bar{\Gamma}$ étant le tenseur des tensions visqueuses dont l'expression en coordonnées cartésiennes s'écrit :

$$\bar{\Gamma} = -\eta(T) \left(\frac{\partial V_i}{\partial x_j} + \frac{\partial V_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial V_\alpha}{\partial x_\alpha} \right) \quad (\text{II. 16})$$

Puisque l'on travaille en coordonnées cylindriques, avec les hypothèses d'une symétrie de révolution autour de l'axe z , les composantes du tenseur de viscosité seront données par les relations suivantes tirées de l'ouvrage de Bird, Stewart, et Lightfoot [38]) :

$$\begin{cases} \tau_{rr} = -\eta(T) \left(2 \frac{\partial V_r}{\partial r} - \frac{2}{3} \operatorname{div} \vec{V} \right) \\ \tau_{zz} = -\eta(T) \left(2 \frac{\partial V_z}{\partial z} - \frac{2}{3} \operatorname{div} \vec{V} \right) \\ \tau_{rz} = -\eta(T) \left(2 \frac{\partial V_z}{\partial r} - \frac{2}{3} \frac{\partial V_r}{\partial z} \right) \\ \tau_{\theta\theta} = -\eta(T) \left(2 \frac{V_r}{r} - \frac{2}{3} \operatorname{div} \vec{V} \right) \end{cases} \quad (\text{II. 17})$$

II-2-2-3- Equation de conservation de l'énergie :

Dans l'équation (II. 13) le rôle du terme source $\int_{\vec{w}} \frac{1}{2} M w^2 \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} \right\}_{\text{coll}} d^3 w$ sert d'accroître directement l'énergie d'agitation thermique du gaz. Dans le cas d'un gaz moléculaire (air par exemple), l'énergie $f_t \cdot \vec{J} \cdot \vec{E}$ déposée par unité de temps, dans le milieu dissipatif, est absorbée, en fonction de l'état statistique du gaz, et des différentes sections efficaces de collisions, dans plusieurs "réservoirs", se déversant dans le réservoir thermique, en des temps différents, et parfois supérieurs à la durée de la décharge. Or, l'équation (II. 13) n'est rigoureusement valable, que lorsque toutes les composantes de l'énergie interne sont en équilibre thermodynamique avec la température cinétique du gaz, c'est-à-dire sur une échelle de temps telle que tous les transferts vers le "réservoir" thermique ont eu le temps de s'effectuer. On conçoit donc aisément que l'utilisation de l'équation (II. 13), ne soit légitime qu'après son adaptation à notre problème.

Dans le cas général, l'énergie déposée, lors des transferts énergétiques avec les particules chargées, stockée par le milieu neutre sous plusieurs formes : translationnelle, rotationnelle, vibrationnelle, énergie d'excitation électronique, de dissociation et d'ionisation. Dans le tableau (II.1). Nous représentons la répartition de l'énergie électronique transférée aux molécules neutres dans les cas de l'air. Sur le même tableau est indiquée l'estimation de la fraction d'énergie perdue pour chaque type de collision telle qu'elle a été présentée par I. Gallimberti, (1979). Cette valeur variant avec le champ réduit considéré, nous avons uniquement indiqué les valeurs extrêmes dans la gamme 30-300 Td. Ainsi pour une décharge dont la durée est de quelques microsecondes (notre cas), seules les composantes de translation, de rotation et une partie importante de l'énergie d'excitation électronique, contribuent à une augmentation immédiate de la température.

Type de collision	Fraction d'énergie	Temps de relaxation réservoir thermique
Excitation électronique	0.1 -----0.8	10^{-10} ----- $10^{-2} s$
Excitation rotationnelle	10^{-3} -----0	$10^{-10} s$
Excitation vibrationnelle	10^{-2} -----0.8	$10^{-4} s$
Collision élastique	5.10^{-2} -----0	Immédiat
Dissociation	5.10^{-2} -----0.2	Immédiat

Tableau II.1. Transfert d'énergie électron-neutre dans l'air (G.Forn)

Le terme source $\int \frac{1}{2} M w^2 \left\{ \frac{\partial f}{\partial t} \right\}_{coll} d^3 w$ ne tient compte de l'énergie fournie sous la forme $\Phi(\vec{r}, t) = \vec{w}_t \cdot \vec{j} \cdot \vec{E}$, \vec{j} est la densité de courant total, \vec{E} le champ électrique régnant dans la décharge et f_t le facteur de transfert d'énergie qui est compris entre 0 et 1. Nous nous intéressons, strictement à la dynamique des neutres, et nous n'avons donc accès directement ni à la densité de courant ni au champ électrique. Nous prendrons donc, pour le terme d'injection $\Phi(\vec{r}, t)$, une expression globale, estimée à partir des résultats expérimentaux et que nous ajusterons en comparant les résultats de la simulation et ceux d'expérience. Suite à ces remarques, l'équation de conservation de l'énergie s'écrit alors :

$$\frac{\partial}{\partial t} (W_{th} + W_c) + \vec{\nabla} \cdot \{ (W_{th} + W_c) \vec{V} \} = f_t \vec{j} \cdot \vec{E} + K(T) \nabla^2 T - \vec{\nabla} \cdot \{ (P \vec{I} + \vec{\Gamma}) \vec{V} \} \quad (II. 18)$$

où I est la matrice unité et Γ le tenseur des forces de viscosité déjà explicité (voir formule(II. 16)); $K(T)$ et $\eta(T)$ représentent respectivement les coefficients de conductivité thermique et de viscosité. Nous avons utilisé les données expérimentales et théoriques fournis dans le cadre de l'équilibre thermodynamique.

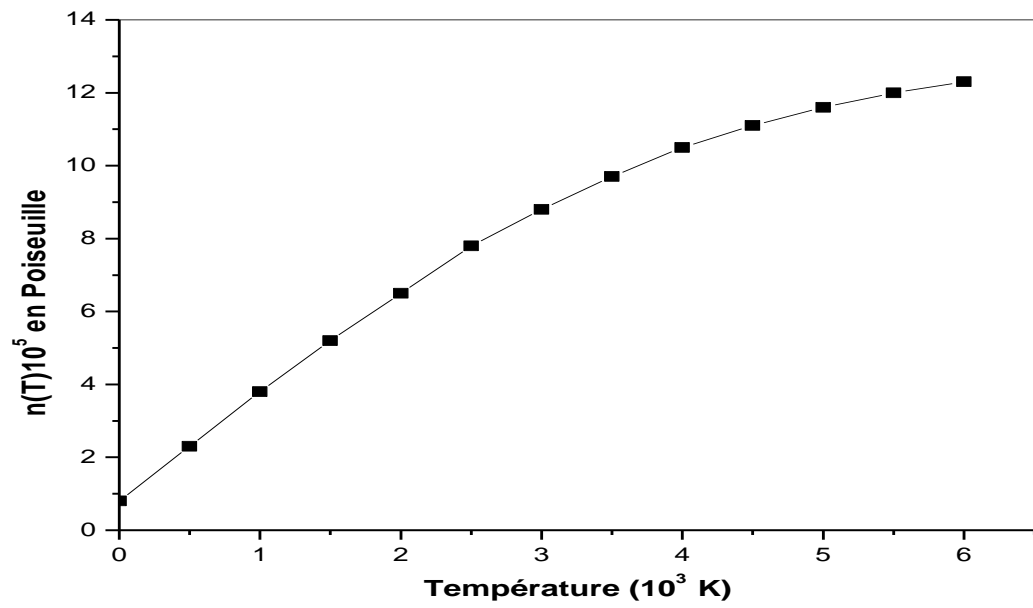


Figure II.1. coefficient de viscosité en fonction de la température dans l'air [39]

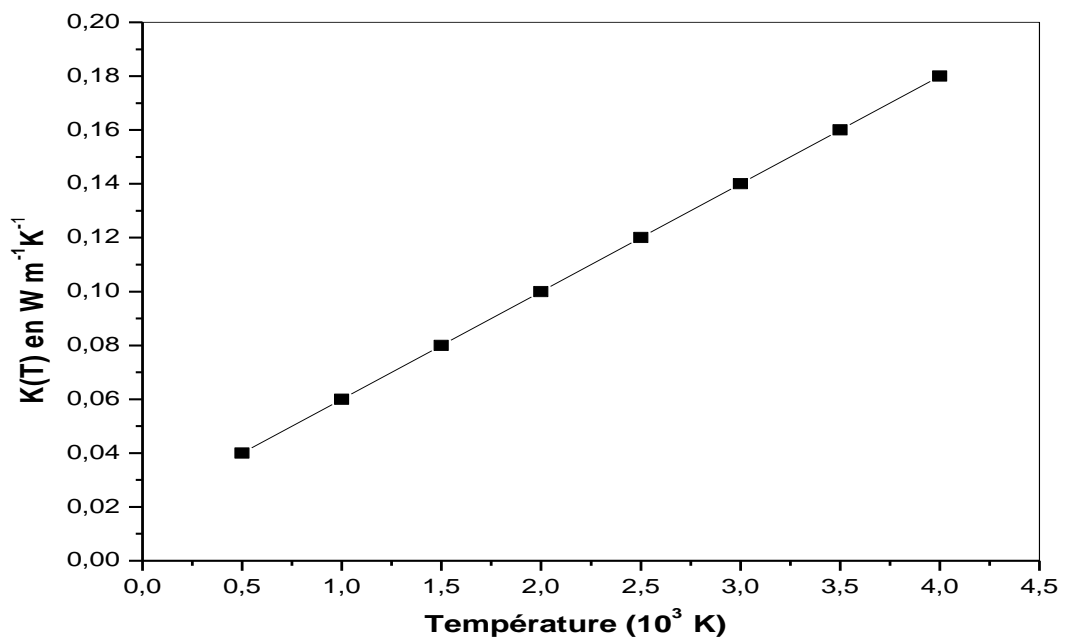


Figure II.2. Coefficient de conductivité thermique en fonction de la température dans l'air [40].

Pour la conductivité thermique, l'air et azote se comportent très différemment, puisque dans l'air, l'influence de la dissociation de l'oxygène intervient rapidement. Dans l'azote jusqu'à 4000 K, la conductivité thermique est due à celle des molécules, R.W. Powell et al (1973) [40] ont approché une loi donnée par l'expression :

$$K(T) = 5.10^{-5}T + 0.0115 \quad (\text{II. 19})$$

avec $K(T)$ en watt/(mètre degré Kelvin) et T en degré Kelvin. Par contre, dans l'air, l'influence de la diffusion de l'énergie de recombinaison molécule – atome ce fait sentir dès 1000 K environ. Nous avons choisi une expression rendant compte des données de (M.N.Plooster[39]) :

$$K(T) = 2.6405 \cdot 10^{-4}T - 5.6216 \cdot 10^{-2} \quad (\text{II. 20})$$

avec $K(T)$ en watt/(mètre degré Kelvin) et T en degré Kelvin. Pour la viscosité, il apparaît (figure II.1) qu'elle est identique dans l'air et l'azote. D.J.Hirchfelder et al [41] ont approché la viscosité par la relation suivante.

$$\eta(T) = 1.1264 \cdot 10^{-5} + 3.1 \cdot 10^{-8}T - 2.046 \cdot 10^{-12}T^2 \quad (\text{II. 21})$$

avec $\eta(T)$ en poiseuille et T en degré Kelvin. Pour compléter le modèle des neutres, on rajoute l'équation d'état :

$$P(r,z,t) = N(r,z,t) k_B T(r,z,t) \quad (\text{II. 22})$$

Où $k_B = 1.380662 \cdot 10^{-23}$ joule / Kelvin est la constante de Boltzmann

II-3-définition des conditions initiales et aux limites:

Les conditions initiales que nous choisissons pour effectuer notre étude sur l'empreinte thermique sont les suivantes :

à l'état initial ($t=0$), le gaz est supposé immobile, l'expérience est réalisée dans l'air, à la pression atmosphérique (760 torr), dans un endroit où règne une température ambiante (300K). Dans ces conditions, le libre parcours moyen (l.p.m.) des particules neutres est égal à peu près à 0.40 μm , les valeurs des incréments spatiaux choisis, soit

$\Delta r=10 \mu\text{m}$ et $\Delta z=120 \mu\text{m}$, représentent à peu près 25 fois la valeur du libre parcours moyen des neutres, pour la variation radiale.

$$\left| v \frac{\Delta t}{\Delta r} \leq 0.5 \right|$$

L'incrément temporel doit être choisi de telle sorte que la relation de stabilité soit vérifiée. Nous choisissons la valeur $\Delta t=1 \cdot 10^{-9}\text{s}$.

Le problème des conditions aux limites est délicat, on sait que l'impact de la décharge, provoque un effet secondaire sur la surface des électrodes. Cet effet est plus ou moins important selon la phase de la décharge considérée, car la surface des électrodes est soumise aux bombardements de plusieurs sortes de particules. Tout d'abord, au bombardement ionique (ou électronique) pour la cathode (ou l'anode), et au bombardement des neutres dans des états excités (rotationnels, vibrationnels, métastables). La localisation spatiale sur l'électrode de l'impact et ses conséquences sont très différentes selon que l'on considère l'un ou l'autre de ces effets. L'impact des particules chargées, ions ou électrons, est localisée sur une faible surface de la cathode. C'est un effet qui peut provoquer une dégradation de l'électrode (formation d'un petit caractère, avec volatilisation du métal), mais il est localisé dans l'espace de l'électrode, il est thermodynamiquement négligeable. Autrement dit, la température de surface de l'électrode reste basse. Du point de vue de la dynamique des neutres, tout se passe comme si les neutres étaient en contact avec une surface froide. L'impact des particules neutres est plus réparti sur l'ensemble de la surface. A faible pression (de l'ordre de la dizaine de torr ou moins), on sait que cet effet de l'impact de neutres est suffisamment important pour provoquer un échauffement de la surface. Cette propriété est d'ailleurs utilisée pour certains traitements de surface. A la pression atmosphérique, les effets semblent beaucoup moins importants.

II-4- Modélisation de l'injection d'énergie :

Le passage de courant électrique dans un gaz, provoque sur le gaz, outre les effets d'ionisation d'excitation, deux actions qui vont induire des mouvements convectifs ; il s'agit des transferts directs de quantité de mouvements, des électrons ou ions vers les neutres, et de l'effet Joule qui conduit à une augmentation locale de température. Dans la situation de gaz faiblement ionisé, qui est celle que nous étudions, les

mouvements convectifs qui résultent des transferts directs, peuvent être négligés, devant ceux qui résultent du gradient local de température, comme nous l'avons exprimé précédemment. Moyennant quoi, l'effet de la décharge sera estimé par le seul aspect de l'injection d'énergie qu'elle produit. Nous nous donnons donc un profil, non pas de la décharge mais de l'injection d'énergie associée. Ce qui est simulé c'est le terme d'effet Joule local, fonction de l'espace et du temps.

$$\Phi(r, z, t) = f_t \vec{j} \cdot \vec{E} \quad (\text{II.23})$$

Il inclut une représentation globale, non séparable, de trois grandeurs fondamentales : f_t -scalaire, qui représente l'efficacité de transfert d'énergie thermique des particules chargées vers les neutres. \vec{j} la densité de courant totale. \vec{E} le champ électrique local, incluant les effets de charge d'espace. La fonction $\Phi(r, z, t)$, peut être très différente des deux fonctions qu'elle est nécessairement semblable aux profils plus ou moins connus du courant, comme par exemple le profil défini par la loi de Warburg (A. Gibert et al. (1983), P. Bayle et al. (1990), C.Venin (1992)) [42]. sert donc, comme une source d'énergie dans l'équation des neutres. Nous choisissons pour cette injection d'énergie cinq fonctions de cinq profils différents donnant une distribution spatiale inhomogène dans l'espace inter-électrodes.