

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la
Recherche Scientifique



UNIVERSITE ABOU BEKR BELKAID TLEMCEN

Faculté des Sciences
Département de Physique

Mémoire

en vue de l'obtention du Diplôme de Magistère
Option : Physique des Plasmas

Présenté par

KEBBAB Meriem

Thème

**Contribution à l'analyse des solutions analytique
et numérique de l'équation de Vlasov**

Soutenu le **Octobre 2012**, devant le jury :

LEMERINI Mostefa	professeur	Président
LIANI Bachir	Professeur	Encadreur
BOUHAFS Benamar	Maître de conférences	Examineur
BENTALHA Zine El Abidine	Maître de conférences	Examineur

Année universitaire : 2012 - 2013

Remerciements

Avec l'aide de Dieu tout puissant, j'ai pu accomplir ce travail qui a été réalisé au sein de Laboratoire de Physique Théorique (LPT) du département de Physique de la Faculté des Sciences de l'Université de Tlemcen sous la direction de Monsieur LIANI Bachir Professeur à la faculté des sciences de l'université de Tlemcen, que je remercie chaleureusement, pour m'avoir accordé sa confiance pour diriger cette thèse. Ses grandes qualités scientifiques et humaines ont permis que ce travail puisse avancer rigoureusement. Merci Monsieur LIANI pour la gentillesse, et de m'ouvrir la porte de recherche.

Je tiens à remercier profondément Mr LEMERINI Mostefa, Professeur à l'UABT pour m'avoir fait l'honneur de présider le jury de ma thèse.

J'exprime également ma profonde gratitude à tous les membres du jury qui ont accepté de juger ce mémoire. A Messieurs, BOUHAFS Benamar, Maître de Conférences à l'Université de Tlemcen et BENTALHA Zine El Abidine, Maître de conférences à l'Université de Tlemcen, pour leur disponibilité et pour avoir bien voulu examiner ce travail.

Mes sincères remerciements à Mr SARI Abdelhamid, Maître de Conférences à l'UABT pour ses conseils précieux et sa disponibilité généreuse durant l'année 2011 et aussi ses grandes qualités scientifiques.

Je tiens ainsi à adresser mes sentiments de reconnaissance à tous ceux qui m'ont aidé durant la préparation de ce Mémoire, en particulier M^{elle} SENOUDI Assia Rachida, Maître de Conférences à l'UABT. Merci M^{elle} pour votre disponibilité, gentillesse, et toutes les remarques précises.

Un grand merci à tous mes collègues du Laboratoire de Physique Théorique et à tous mes amis.

Enfin, je remercie du fond du cœur toute ma famille pour son appui durant toutes ces années.

Un grand merci à tous ceux qui me sont chers.

Dédicace

Je dédie ce travail à :

A ma très chère mère

A la mémoire de mon père qu'il se repose en paix

A mon cher frère et mes chères sœurs

A mes amies : Hafida, Amina, Nouara, Latifa,

Table des matières

Introduction général	1
CHAPITRE I : Phénomènes dans les plasmas	6
I.1 Introduction.....	6
I.2 Les décharges électriques.....	6
I.3 Les processus de collisions.....	8
I.3.1 Collision élastique.....	8
I.3.2 Collision inélastique.....	10
• Excitation.....	10
• Ionisation – Recombinaison.....	11
• Attachement.....	12
• Transfert de charge.....	12
I.4 Section efficace de diffusion.....	13
I.5 Libre parcours moyen.....	15
I.6 Description statistique des gaz classiques dilués.....	15
I.6.1 Gaz classique dilué.....	16
I.6.2 la fonction de distribution à une particule.....	16
a) Echelle de temps.....	17
b) Echelle de longueur.....	18
CHAPITRE II : Equations cinétiques	19
II.1 Introduction.....	19
II.2 Equation de Liouville d'un gaz pur.....	20
II.2.1 Densité dans l'espace des phases.....	20
II.2.2 Equation de Liouville pour des variables conjuguées.....	21

II.3	Système d'équations de BBGKY.....	23
II.3.1	Fonction de distribution et densité simples.....	23
II.3.2	Fonction de distribution et densité doubles.....	24
II.3.3	Fonctions de distribution et densités multiples.....	26
II.3.4	Système d'équations de BBGKY.....	26
a)	Equation d'évolution de f_1	26
b)	Equation d'évolution de f_{12}	28
c)	Système d'équations de BBGKY. Méthodes de fermeture.....	28
II.4	Equations cinétiques d'un gaz pur.....	29
II.4.1	Equation de Liouville à une particule.....	29
II.4.2	Equation de Vlasov.....	30
II.4.2	Equation de Boltzmann.....	31
I.5	Conclusion.....	32
CHAPITRE III : Résolution analytique de l'équation de Vlasov.....		34
III.1	Introduction	34
III.2	Rappels mathématiques.....	34
III.2.1	Le théorème des résidus.....	34
III.2.2	La transformée de Laplace.....	35
a)	Introduction.....	35
b)	Définition.....	36
c)	Inversion de la transformée de Laplace.....	36
III.2.3	La transformée de Fourier.....	37
a)	Introduction.....	37
b)	Transformée de Fourier d'une fonction d'une variable.....	37
c)	Inversion de la transformation de Fourier.....	38
III.3	Etude de l'équation de Vlasov-Poisson linéarisée.....	38
III.4	Amortissement Landau.....	48

CHAPITRE IV : Méthodes numériques pour la résolution de l'équation de Vlasov et celle de Boltzmann.....51

A) La résolution numérique de l'équation de Vlasov

IV.1 Introduction.....	51
IV.2 Les équations de Vlasov-Maxwell et Vlasov-Poisson.....	51
IV.2.1 Les équations de Maxwell.....	51
IV.2.2 Les équations de Maxwell en 3D.....	52
IV.2.3 Les équations de Maxwell en 2D.....	54
IV.2.4 Du système de Vlasov-Maxwell au système de Vlasov-Poisson.....	55
IV.2.5 Conservation de la charge.....	57
VI.3 La méthode numérique PIC (Particle-In-Cell).....	58
VI.3.1 Introduction.....	58
IV.3.2 Couplage avec les équations de Maxwell.....	58
IV.3.3 approximation particulière de l'équation de Vlasov.....	58
IV.4 La méthode numérique semi-Lagrangienne.....	59

A) La résolution numérique de l'équation de Boltzmann par Monte Carlo

IV.5 La méthode numérique Monte-Carlo (MC).....	61
IV.5.1 Introduction.....	61
IV.5.2 Principe de la méthode.....	62
IV.5.3 Génération de nombres aléatoires	63
IV.5.4 Calcul du temps de vol libre.....	64
IV.5.5 Equations du mouvement de l'électron entre deux collisions successives.....	66
a) Champ magnétique transversal ($B \perp E$).....	66
b) Cas d'un champ longitudinal ($B // E$).....	68
IV.5.6 Calcul des probabilités de collision.....	69
IV.5.7 Traitement des collisions.....	70
a) Collision élastique.....	70

b) Collision inélastique conservatives (excitation).....	72
c) Collision inélastique non-conservatives (ionisation).....	73
d) Collision entraînant l'attachement électronique.....	73
IV.5.8 Calcul des paramètres de transport.....	73
a) Vitesse de dérive.....	74
b) Coefficient de diffusion transversal.....	74
c) Coefficient de diffusion longitudinal.....	75
d) Coefficient d'ionisation.....	75
e) Coefficient d'attachement.....	75
f) Energie moyenne.....	76
CHAPITRE V : Résultats et discussions.....	77
V.1 Introduction.....	77
V.2 Sections efficaces utilisées.....	77
V.3 Résultats obtenus.....	78
V.3.1 Vitesse de dérive.....	81
V.3.2 Coefficient de diffusion transversal.....	84
V.3.3 Coefficient de diffusion longitudinal.....	87
V.3.4 Coefficient d'ionisation.....	89
V.3.5 Coefficient d'attachement.....	92
V.3.6 Fonction de distribution.....	94
Conclusion et perspectives.....	98
Références	100

Introduction général

Un plasma est un gaz constitué de particules chargées, ionisées, et dont la densité satisfait simultanément deux critères. Elle doit être suffisamment élevée pour que les particules obéissent aux lois statistiques, mais assez faible pour que les interactions binaires soient négligeables comparées aux forces coulombiennes de longue portée. En fait, la caractéristique d'un plasma est la prépondérance des effets collectifs sur les interactions entre les particules.

Au-dessus d'une température de 100 000 K, la matière est dans un état ionisé. Pour cette raison, le plasma est parfois appelé le quatrième état de la matière. En effet, l'augmentation de la température provoque le passage de l'état solide à l'état liquide. De même, si la température d'un liquide est assez élevée, il se transforme en gaz. Enfin, si un gaz est porté à très haute température, les particules sont ionisées, et l'on obtient un plasma.

Bien que les plasmas soient très peu présents sur la Terre dans leur état naturel, leurs applications sont de plus en plus diversifiées. Dans la vie de tous les jours, on trouve les plasmas dans les tubes à décharge électrique (tubes à néons), les arcs électriques... Les premiers travaux d'expériences concernant la physique des plasmas remontent aux années vingt par Langmuir, Tonks... Par exemple, les décharges électriques sont utilisées dans le traitement de matériaux et de surfaces. Les plasmas se retrouvent également dans les écrans plats. Cependant, l'application majeure de la physique des plasmas est la recherche sur la fusion thermonucléaire contrôlée qui a pour but d'obtenir une énergie propre et renouvelable utilisant la fusion à l'image de ce qui se produit dans une bombe à hydrogène ou dans le soleil [1].

De fait, la recherche en physique des plasmas est importante. La production de plasma coûtant cher, il est important de développer la simulation numérique des plasmas. On dispose actuellement trois types de modèles :

- Le modèle microscopique: on considère le mouvement individuel de chaque particule, régi par la loi de Newton. Mais le nombre de particules dans un plasma est trop grand (de l'ordre de 10^{20}) pour pouvoir appliquer ce modèle [2].
- Le modèle mésoscopique ou cinétique: Dans ce modèle, chaque espèce de particules est caractérisée par la moyenne statistique de sa répartition dans l'espace des phases (i.e. des positions et des vitesses). La fonction de distribution est définie comme la fonction qui donne la probabilité de présence des particules pour un instant t et une position (x, v) de l'espace des phases. On peut maintenant faire une des deux approximations suivantes :
 - en considérant uniquement des collisions binaires avec des particules voisines, la fonction de distribution satisfait l'équation de Boltzmann.
 - en supposant que les particules interagissent uniquement par le champ moyen (solution des équations de Maxwell) qu'elles génèrent, la fonction de distribution est solution du système Vlasov–Maxwell.

Le choix entre ces deux approximations se fait en fonction du temps de parcours moyen, défini comme le temps moyen avant qu'une particule du plasma n'entre en collision avec une autre particule. Dans le cas où le temps de simulation est inférieur au temps de parcours moyen, il s'agit d'un plasma sans collision et on peut utiliser le modèle Vlasov-Maxwell.

- Le modèle macroscopique ou fluide: lorsque le plasma est proche de l'équilibre thermodynamique, donc ce modèle est valable quand la fonction de distribution est proche de la distribution de Maxwell–Boltzmann, on dit alors qu'on a une fonction Maxwellienne. Ce modèle se base sur un ensemble de lois de conservation de grandeurs macroscopiques, incluant la densité n , la vitesse moyenne v , et la pression scalaire p [3].

La modélisation des plasmas et des faisceaux de particules chargées peut se faire par une fonction statistique dite fonction de distribution qui représente la probabilité de présence de particules en un point de l'espace des phases. Cette fonction est alors solution de

l'équation de Vlasov qui fait intervenir un champ électromagnétique créé par les particules chargées, lui-même solution des équations de Maxwell. Sous certaines hypothèses, le modèle peut être réduit au problème de l'équation de Vlasov couplée à une équation de Poisson.

Dans l'étude de méthodes numériques pour résoudre ces problèmes de type Vlasov-Poisson ou Vlasov-Maxwell, deux axes de recherche peuvent être dégagés. D'abord la résolution de l'équation de Vlasov en elle-même est un défi, car elle possède la particularité d'être posée dans l'espace des phases, et donc en 3D posée dans \mathbb{R}^6 . Ensuite son couplage avec les équations de Maxwell oblige alors à privilégier certaines méthodes de résolution pour ces dernières [4]. Premièrement, pour résoudre l'équation de Vlasov, on peut dégager deux grandes méthodes: la méthode particulaire dite PIC (Particle In Cell) et la méthode numérique semi-Lagrangienne. La première méthode est la méthode PIC qui consiste à suivre la trajectoire de grands ensembles de particules -des macro-particules- qui décrivent le plasma dans l'espace des phases. Pour cela on se donne une distribution initiale i.e. une collection de N macro-particules de position et vitesse aléatoires que l'on fait évoluer de façon déterministe suivant l'équation de Vlasov. La deuxième méthode est la méthode semi-Lagrangienne qui permet d'avancer la fonction de distribution connue aux points d'un maillage de l'espace des phases en deux étapes. La première consiste à calculer l'origine des trajectoires des particules aboutissant aux nœuds du maillage de l'espace des phases et la deuxième en une interpolation par splines cubiques par exemple sur un maillage uniforme.

On s'est aussi intéressé dans ce travail à la résolution numérique de l'équation de Boltzmann et le calcul des paramètres de transport des électrons (vitesse de dérive, les coefficients de diffusion et les coefficients d'ionisation et d'attachement) soumis à l'action simultanée de champ électrique et magnétique uniformes dans le cas d'une décharge dans un gaz faiblement ionisé par la méthode numérique Monte Carlo. L'équation de Boltzmann est une équation d'évolution d'un gaz peu dense dont les particules interagissent uniquement par des collisions binaires.

Dans la littérature, il existe de nombreux travaux théoriques et expérimentaux consacrés à l'étude de l'influence du champ électrique sur les décharges électriques dans les gaz faiblement ionisés, les domaines d'application de ce type de décharge sont connus et couvrent notamment les problèmes d'isolation gazeuse, de laser à gaz, de traitement de surface par plasma, etc....

Par contre, les travaux consacrés à l'étude de l'influence du champ magnétique dans les décharges dans des gaz faiblement ionisés sont beaucoup moins nombreux. Les situations particulières induites dans la décharge (en raison de la présence d'un champ magnétique en plus du champ électrique habituel) peuvent mettre en évidence certains phénomènes aidant à mieux comprendre les processus d'évolution et de formation de la décharge. Parmi les applications le plus directement liées à la présence simultanée d'un champ électrique et magnétique, on peut citer l'étude des propriétés de claquage des gaz, les mesures de certains paramètres de transport simplifiés grâce à la déflexion magnétique des électrons et l'étude de la région cathodique des décharges luminescentes où le champ magnétique sert à réduire les instabilités de la décharge, etc....

Dans cette étude, on va utiliser la méthode de Monte-Carlo pour étudier le transport électronique dans une décharge et pour calculer la fonction de distribution solution de l'équation de Boltzmann en raison de sa plus grande facilité à mettre en œuvre surtout dans les situations complexes rencontrées en présence de champ électrique et magnétique. Cette méthode 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. A tout instant et en tout point de la décharge. Grâce à la méthode de Monte Carlo on peut déterminer la trajectoire et la vitesse de chaque électron.

Le contenu de cette thèse est réparti en quatre chapitres sont organisés de la manière suivante :

Dans le premier chapitre qui suit cette introduction générale, on fait quelques rappels sur les plasmas, notamment les décharges électriques et les processus de collision.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude de quelques équations cinétiques telle que l'équation de Liouville, Vlasov et Boltzmann.

Dans le troisième chapitre on fait une résolution analytique de l'équation différentielle non linéaire de Vlasov par une technique mathématique « transformé de Fourier-Laplace ».

Dans le quatrième chapitre, on présentera les deux méthodes numériques PIC et la méthode semi Lagrangienne pour le système Vlasov-Maxwell et Vlasov-Poisson et on exposera aussi quelques rappels sur la méthode Monte Carlo qui est basée sur le tirage des nombres aléatoires. On expliquera ensuite comment ces nombres peuvent être utilisés pour calculer le temps de vol d'une particule entre deux collisions, choisir le type de collision que cette particule doit subir ainsi que la perte d'énergie.

Dans le cinquième chapitre on décrit et interprète les résultats obtenus en présence de champ électrique et magnétique d'abord perpendiculaires puis parallèle dans le cas particulier d'une décharge dans l'hydrogène (H_2) et dans l'azote (N_2).

Enfin, nous terminons ce mémoire par une conclusion général.

CHAPITRE I

Phénomènes dans les plasmas

I.1 Introduction

Le terme "plasma", introduit en physique en 1928 par le physicien Langmuir, désigne un gaz ionisé électriquement neutre. Un plasma est donc un milieu constitué d'un ensemble de particules neutres (atomes, molécules, radicaux), des ions, des électrons, des photons émis et absorbés, et finalement un champ électromagnétique propre au système et/ou appliqué. En réalité, plus de 99% de l'univers est sous forme de plasma. Ce quatrième état de la matière, se trouve dans les nébuleuses, dans le nuage d'hydrogène composant le milieu interstellaire, dans les étoiles (cœur de l'étoile siège de réactions de fusion nucléaires), et dans l'environnement terrestre (ionosphère, magnétosphère, foudre). Les plasmas sont aussi créés de façon artificielle, en laboratoire (décharges électrique, tokamaks). Les décharges électriques dans les tubes fluorescents et les plasmas de fusion dans les tokamaks en constituent deux exemples.

Par ailleurs, le développement de la physique des plasmas, a permis la découverte de nombreuses applications technologiques telles que les lampes à néon, les télévisions à écran plasma, les écrans plasmas, ainsi que tous les composants électroniques nécessitant un traitement de surface par un plasma (dépôt, gravure, implantation ...).

Pour créer un plasma à partir d'un gaz neutre, il faut fournir de l'énergie pour arracher un ou plusieurs électrons à chaque atome. Il faut donc qu'une énergie suffisante soit fournie aux atomes pour qu'ils soient partiellement, ou même totalement ionisés. Cette énergie peut être fournie de plusieurs façons : décharge électrique, le chauffage

I.2 Les décharges électriques dans les gaz

Pour ioniser un gaz, on l'injecte dans une enceinte confinée sous vide partiel ou à pression atmosphérique. Le plasma est ensuite généré par l'action d'une décharge électrique dans le gaz, qui a pour rôle de transférer de l'énergie à ce gaz pour l'exciter et l'ioniser. En effet, du fait de leur faible masse, les électrons libres récupèrent la quasi-

totalité de cette énergie et provoquent, par collisions avec les particules lourdes du gaz, leur excitation et ionisation et donc l'entretien du plasma.

On distingue plusieurs types de décharges électriques :

1. Les décharges électriques en courant continu (DC) qui consistent à appliquer un champ électrique intense entre deux électrodes placées dans une enceinte (Figure (I-1)).

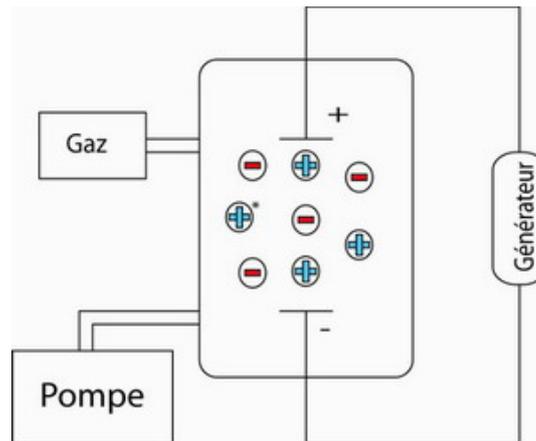


Figure (I-1) : Décharge électrique DC

2. Les décharges sans électrodes produites par un champ électromagnétique variable de type basses fréquences, radiofréquences ou microondes (Figure (I-2)).

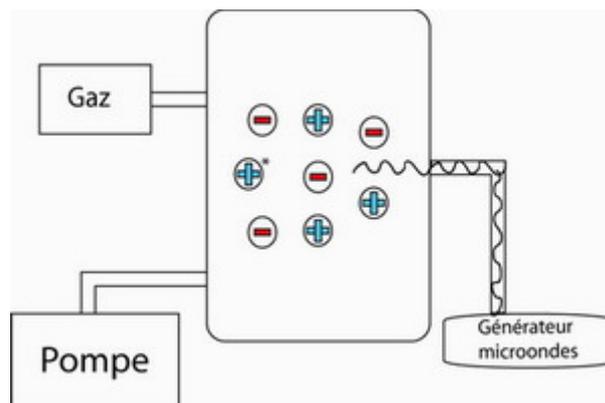


Figure (I-2) : Décharge électrique par onde électromagnétique

Remarque 1 : L'étoile associée à l'ion dans les figures signifie un ion excité

Si la décharge alimentée en continu ou en radiofréquences est accompagnée d'un champ magnétique, on a une décharge de type magnétron. La présence d'un champ magnétique intense dans un champ électromagnétique micro-ondes conduit à un processus d'excitation du plasma à la résonance cyclotronique électronique (ECR).

Le type de décharge est choisi en fonction du type d'application ou d'étude qu'on veut réaliser.

I.3 Les processus de collisions

L'étude des collisions est une application très intéressante, et particulièrement instructive, des lois de la mécanique concernant la quantité de mouvement et l'énergie cinétique. Dans l'étude d'une collision, on ne s'intéresse pas au détail de l'interaction, mais seulement aux caractéristiques de chacune des particules avant et après l'interaction. Le terme collision est à prendre au sens large, il n'y a pas forcément un contact "physique" pour les objets (comète autour du soleil ou déviation des charges électriques par exemple).

Deux types de collisions doivent être considérés :

- les collisions élastiques où la vitesse des particules est changée mais pas leurs énergies internes.
- les collisions inélastiques où la nature, ou l'état interne, des particules sont modifiés lors de la collision.

I.3.1 Collision élastique

Par définition lors d'une collision élastique, l'énergie interne des particules entrant en collision ne subit aucune modification. Il y a simplement un changement de direction des particules, avec une redistribution des énergies de translation entre les deux (Figure(I-3)). Ceci se traduit par la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie cinétique.

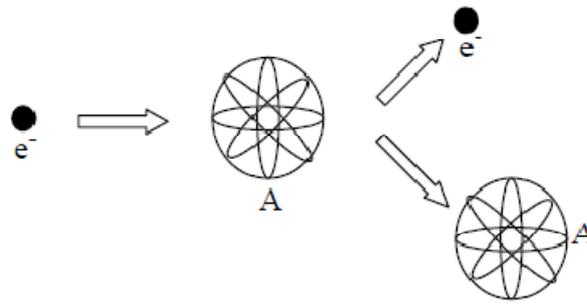


Figure (I-3) : Représentation simplifiée d'une collision élastique électron-atome.

On considère une collision entre deux molécules. On désigne par p et p_1 les quantités de mouvement des deux molécules avant la collision, et par p' et p'_1 leurs quantités de mouvement après celle-ci. Les énergies cinétiques correspondantes sont désignées respectivement, par ε , ε_1 et ε' , ε'_1 . La collision étant considérée comme locale et instantanée, la quantité de mouvement totale est conservée lors du choc :

$$p + p_1 = p' + p'_1 \quad (I.1)$$

De plus, la collision étant, supposée élastique, l'énergie cinétique totale est conservée :

$$\varepsilon + \varepsilon_1 = \varepsilon' + \varepsilon'_1 \quad (I.2)$$

En introduisant la quantité de mouvement totale avant la collision $\Pi = p + p_1$ et la quantité de mouvement relative avant la collision $\pi = \frac{1}{2} (p_1 - p)$, ainsi que les quantités correspondantes Π' et π' après la collision, on peut réécrire les équations de conservation (I.1) et (I.2) sous la forme équivalente :

$$\Pi = \Pi' \quad (I.3)$$

$$|\pi| = |\pi'| \quad (I.4)$$

La collision étant élastique donc elle produit une rotation de π qui l'amène sur π' sans changer son module. La collision est complètement déterminée par la donnée de Π et π , ainsi que des angles (θ, ϕ) dits angles de diffusion, de π' par rapport à π .

Le problème est équivalent à celui de la diffusion d'une molécule par un centre de forces fictif fixe, représenté par le point O sur la figure (I-4). La molécule s'approche de O avec une quantité de mouvement π et un paramètre d'impact b . Comme $|\pi| = |\pi'|$ l'état final est précisé par les deux angles de diffusion θ et ϕ , désignés collectivement par Ω .

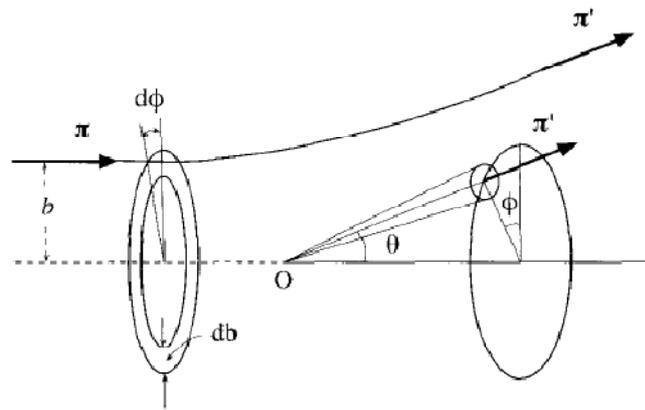


Figure (I-4) : Diffusion d'une molécule par un centre de forces fixe O.

La seule donnée des quantités de mouvement initiales p et p_1 ne suffit pas à déterminer complètement la collision, parce que le paramètre d'impact n'est pas précisé. La donnée de p et p_1 définit en fait une classe de collisions avec différents paramètres d'impact, et donc différents angles de diffusion.

On décrit généralement cette classe de collisions en imaginant un faisceau de particules de quantité de mouvement initiale π , uniformément réparti dans l'espace, incident sur le centre de forces O. Le flux incident est défini comme le nombre de molécules traversant par seconde l'unité de surface perpendiculaire au faisceau incident. Par définition de la section efficace différentielle de collision $\sigma(\Omega)$, le nombre de molécules défléchies par seconde dans une direction contenue dans l'élément d'angle solide $d\Omega$ est égal au produit du flux incident par $\sigma(\Omega)d\Omega$. Dans cette description classique de la collision, on écrit :

$$\sigma(\Omega) = b db d\Phi$$

La section efficace différentielle $\sigma(\Omega)$ est une quantité directement mesurable, qui peut aussi être calculée si le potentiel d'interaction de paire est connu.

I.3.2 Collision inélastique

Les collisions inélastiques qui sont au contraire celles dans lesquelles il y a changement d'état interne d'au moins une des particules (excitation, désexcitation) et même éventuellement création ou destruction de particules (ionisation, dissociation, recombinaison, ...). Dans les collisions inélastiques qui se produisent au cours des réactions chimiques, il y a non seulement échange de quantité de mouvement et

d'énergie cinétique, mais aussi transformation d'énergie cinétique en énergie chimique et vice versa.

Ces collisions sont susceptibles de créer ou de faire disparaître des particules dans le gaz. Elles sont donc très importantes pour l'étude de la production et de la destruction des plasmas. Elles jouent un rôle important dans la dynamique des gaz ionisés.

L'interaction d'une particule massive avec un photon peut être considérée comme une collision inélastique.

- **Excitation**

La collision inélastique est dite conservative lorsqu'il y a le nombre de particule avant et après collision même si l'énergie cinétique n'est pas conservée. C'est le cas par exemple des collisions entraînant l'excitation des niveaux optiques, vibrationnelles ou rotationnelles des molécules cibles.

Les processus d'excitation deviennent significatifs lorsque le champ réduit augmente, cela entraîne une augmentation de l'énergie des particules projectiles au-delà du seuil d'excitation. Dans la figure suivante on représente le schéma simplifié de l'excitation par impact électronique, où l'électron effectue une collision avec l'électron de l'orbitale de la particule cible. Si l'énergie transmise à cet électron est supérieure ou égale au seuil d'excitation ε_{exc} , la particule cible passe de l'état fondamental à un état excité qui peut être de type radiatif. Dans ce cas, la désexcitation est accompagnée par une émission de photons. Ceci n'est pas le cas des états excités de type métastables qui se désexcitent en général suite à une collision.

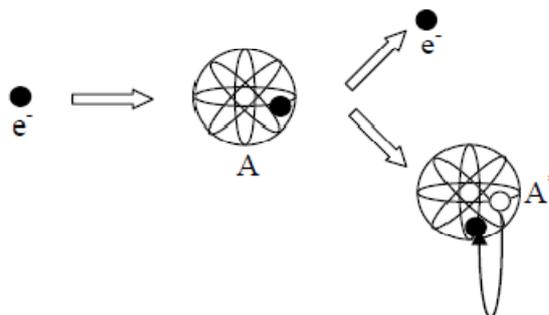


Figure (I-5) : Représentation simplifiée d'une collision d'excitation.

- **Ionisation - Recombinaison**

L'ionisation est un processus majeur pour le maintien de la décharge électrique. L'ionisation par impact électronique de la particule cible donne naissance à un électron et un ion positif. Les électrons éjectés et diffusés sont ensuite accélérés par le champ électrique.

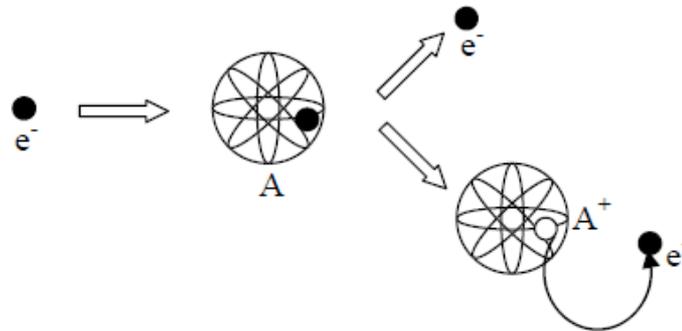


Figure (I-6) : Représentation simplifiée de l'ionisation par impact électronique

Dans le cas d'ionisation par impact électronique, il y a aussi la création d'un ion positif. Ce dernier, prend les paramètres de la particule cible (vitesse, direction, énergie). Un autre processus peut intervenir où l'électron peut effectuer une ionisation dissociative.

La recombinaison c'est la réaction inverse de l'ionisation, elle peut se faire entre un ion positif et un ion négatif. Au cours de la collision, il y a un transfert d'un électron de l'ion négatif vers l'ion positif produisant la neutralisation de ces deux ions. Ce processus joue un rôle important pour la diminution des ions négatifs et par suite la balance de cette espèce dans les décharges basse pression. Il peut y avoir aussi une recombinaison quand un électron rencontre un ion positif. Dans ce cas, il y a une probabilité que l'électron soit capturé par l'ion, surtout si l'énergie de l'électron est relativement faible, ainsi produisant une particule neutre. Il y a plusieurs types de réactions qui peuvent donner lieu à cette "disparition de charges" par recombinaison.

- **Attachement**

Dans les gaz électronégatifs (O_2 , N_2 , Cl , $F...$), les atomes ou les molécules en raison de leur affinité électroniques peuvent devenir des ions négatifs lors d'un impact électronique. Ce processus peut jouer un rôle très important parce qu'il modifie le transport et le champ électrique de charge d'espace dans le plasma.

Le schéma simplifié du processus d'attachement est donnée sur la figure (I.10). Après une collision d'attachement, l'électron va s'accrocher sur une orbitale de la particule cible A pour donner un ion négatif A^- .

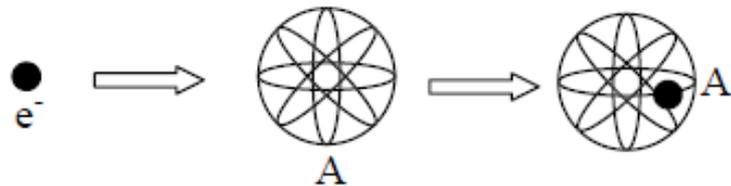


Figure (I-7) : Représentation simplifiée de l'attachement direct.

Le processus inverse de ce phénomène c'est le détachement : lors d'une collision entre un ion négatif et une particule neutre, un électron se détache et conduit à la neutralisation de l'ion négatif. On peut aussi avoir un détachement par impact électronique mais qui est généralement négligeable dans le cas des gaz faiblement ionisés. Il faut noter que ce détachement par impact électronique est similaire à l'ionisation par impact électronique, dans le sens où l'électron entre en collision avec un ion négatif libérant un électron et neutralisant l'ion.

- **Transfert de charge**

Ce type de réaction a lieu entre un ion et un atome (ou une molécule). Si l'on se déplace sous l'action d'un champ électrique dans un gaz parent (par exemple l'ion AB^+ dans un gaz AB), le transfert de charge est dite résonant ou symétrique. Par contre, le transfert de charge est dit non-résonant ou asymétrique lorsque l'ion se déplace dans un gaz non-parent (par exemple l'ion A^+ dans le gaz AB). Au cours d'un transfert de charge résonant l'ion énergétique A^+ devient un neutre rapide et le neutre B devient un ion où se commence sa vie par l'énergie thermique du gaz.

Dans les plasmas froids non-thermiques, le transfert de charge joue un rôle important sur la redistribution de l'énergie moyenne des ions dans le plasma car il permet de transformer un ion rapide en un ion lent.

La figure (I-8) montre un schéma simplifiée de transfert de charge non-résonant entre l'ion A^+ et le gaz atomique B.

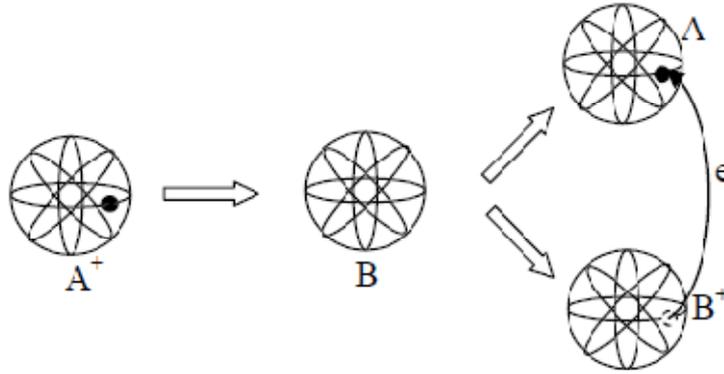


Figure (I-8) : Représentation schématique d'une collision de transfert de charge non-résonant.

I.4 Section efficace de diffusion

Par exemple, considérons le cas d'une réaction élastique donnant lieu à un échange d'impulsion, la vitesse du projectile A , après réaction sur la cible B , est paramétrée par deux angles θ et ϕ décrivant la direction de sortie du projectile ; dans un repère sphérique centré sur la cible θ et ϕ prenant leurs valeurs dans l'intervalle $[0, \pi] \times [0, 2\pi]$: $A + B \rightarrow A(\theta, \phi) + B$. Pour ce type de réaction avec une infinité de voies de sortie la généralisation de la section efficace de réaction nécessite la prise en compte d'un angle solide élémentaire de diffusion $d\Omega = \sin\theta \, d\theta \, d\phi$ et du nombre de particules $d^2n_A(\theta, \phi)$ se trouvant après la réaction dans cet angle solide élémentaire $d\Omega$. La définition de la section efficace différentielle de diffusion angulaire $d\sigma/d\Omega$ est ainsi donnée par :

$$\left. \frac{d^2n_A(\theta, \phi)}{dt d\Omega} \right|_{A+B \rightarrow A(\theta, \phi)+B} = v_A n_A n_B \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad (1.5)$$

La définition précédente peut s'interpréter comme **le rapport du flux angulaire sortant sur le flux surfacique entrant**.

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\left[\frac{\text{Nombre de particule } A \text{ diffusés dans } d\Omega(\theta, \phi)}{\text{par unité d'angle solide } d\Omega \text{ et unité de temps } dt} \right]}{\left[\frac{\text{Nombre de particule } A \text{ incidente}}{\text{par unité de surface } dS \text{ et unité de temps } dt} \right]} \quad (1.6)$$

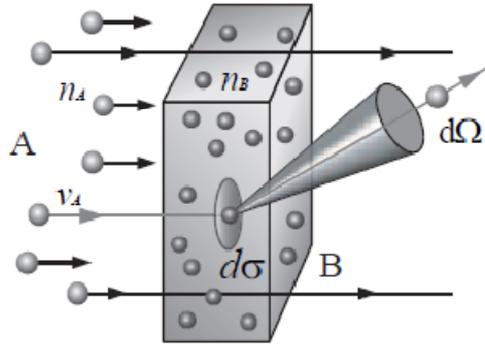


Figure (I-9): Section efficace de diffusion.

Le calcul ou la mesure des sections efficaces est une discipline à part entière qui relève de la physique des collisions atomiques, moléculaires et nucléaires; le physicien des plasmas est un utilisateur de ce type de données, soit dans le cadre de codes numériques d'étude de la réactivité, soit dans le contexte de modèles analytiques cinétiques. Les quantités dérivées de la section efficace que sont le libre parcours moyen, la fréquence de collision et le taux de réactivité sont souvent plus pertinentes en physique des plasmas; Leurs relations avec les sections efficaces sont établies dans le paragraphe suivant.

I.5 Libre parcours moyen

Le libre parcours d'une particule test, interagissant avec une population de particules cibles, est défini comme la distance parcourue par cette particule test entre deux collisions ou réactions successives. Le libre parcours moyen est la valeur moyenne de cette quantité. La fréquence de collision est l'inverse du temps entre deux collisions ou réactions successives, par extension, sa valeur moyenne est aussi dénommée fréquence de collision.

Le libre parcours moyen de la réaction, l , et la fréquence de collision, ν , sont reliés à la section efficace, σ , et à la densité de particules cibles à travers les relations:

$$l = \frac{1}{\sigma n_B} \quad (1.7)$$

$$\nu = \sigma \nu n_B \quad (1.8)$$

I.6 Description statistique des gaz classiques dilués

L'évolution statistique d'un système classique de N particules avec des interactions de paire peut en principe être étudiée au moyen de la hiérarchie BBGKY pour les fonctions

de distribution réduites. Si l'on n'effectue aucune approximation, l'équation d'évolution de la fonction de distribution à une particule fait intervenir la fonction de distribution à deux particules, et ainsi de suite. L'étude de l'évolution de la fonction de distribution à une particule est donc délicate. Dans certains cas, il est toutefois possible, moyennant des approximations convenables, d'obtenir une équation d'évolution fermée pour la fonction de distribution à une particule (chapitre II). Si l'effet des collisions conduisant à l'irréversibilité de l'évolution est pris en compte par ces approximations, l'équation d'évolution obtenue appartient à la classe des équations cinétiques. Il existe divers types d'équations cinétiques, chacune d'entre elles étant relative à un système physique particulier placé dans des conditions données.

Historiquement, les premiers systèmes à avoir été étudiés au moyen d'une équation cinétique sont les gaz classiques dilués de molécules effectuant des collisions binaires. L'approche cinétique repose dans ce cas sur « l'hypothèse du chaos moléculaire », selon laquelle, dans la description d'une collision, les corrélations éventuelles entre les vitesses des deux molécules avant le choc peuvent être négligées. L'évolution de la fonction de distribution à une particule est alors régie par l'équation de Boltzmann (L. Boltzmann, 1872).

De façon générale, la validité des approches cinétiques repose sur l'existence au sein d'un système de deux échelles de temps bien séparées. Dans le cas des gaz classiques dilués auxquels s'applique l'équation de Boltzmann, l'échelle de temps courte est la durée d'une collision, tandis que l'échelle de temps longue est l'intervalle de temps moyen séparant deux collisions successives d'une même molécule.

I.6.1 Gaz classique dilué

Dans la théorie cinétique classique, on s'intéresse à un gaz dilué de N molécules identiques de masse m confinées à l'intérieur d'une boîte de volume V . Le gaz est considéré comme parfait, ce qui signifie que l'énergie potentielle d'interaction entre les molécules est négligeable par rapport à leur énergie cinétique. A température fixée, cette approximation est d'autant meilleure que le gaz est plus dilué. La dilution se traduit par l'inégalité :

$$r_0 \ll d \tag{I.9}$$

Où r_0 désigne la portée des forces intermoléculaires et $d \sim n^{-1/3}$ la distance moyenne entre les molécules ($n = N/V$ est la densité du gaz). Ainsi, les molécules d'un gaz dilué sont la plupart du temps libres et indépendantes. Cependant les collisions, qui redistribuent l'énergie entre les molécules, jouent un rôle essentiel dans l'évolution du gaz vers l'équilibre. Nous étudierons cet effet, en ne prenant en compte que les collisions binaires.

Par ailleurs, la température est supposée suffisamment élevée et la densité du gaz suffisamment faible pour que les molécules puissent être représentées par des paquets d'onde localisés, dont les dimensions, mesurées par la longueur d'onde thermique $\lambda = h(2\pi mkT)^{-1/2}$, sont petites par rapport à la distance intermoléculaire moyenne :

$$\lambda \ll d \quad (I.10)$$

Chaque molécule du gaz peut alors être considérée comme une particule classique possédant une position et une impulsion bien définies. Les molécules sont traitées comme des particules indiscernables.

I.6.2 la fonction de distribution à une particule

Le gaz modélisé par un système de N particules ponctuelles classiques indiscernables est décrit par un hamiltonien dépendant des coordonnées et des impulsions de toutes les particules. L'espace des phases ayant $6N$ dimensions, la fonction de distribution du système dépend, outre le temps, de $6N$ variables coordonnées et impulsions.

Dans le cas d'un gaz dilué, il n'est cependant pas nécessaire de connaître la fonction de distribution complète pour rendre compte de la plupart des propriétés macroscopiques. En effet, une molécule donnée n'interagit jamais avec plus d'une autre à la fois et se meut librement, entre deux collisions successives. La durée τ_0 de chaque collision est beaucoup plus courte que le temps de collision τ , défini comme l'intervalle de temps moyen séparant deux collisions successives d'une même molécule : dans un gaz dilué, une molécule, pour l'essentiel du temps, n'interagit pas avec d'autres. Les propriétés macroscopiques d'un gaz dilué peuvent donc être obtenues à partir de la fonction de distribution à une particule, qui dépend, outre le temps, de six variables coordonnées et impulsions.

c) Echelle de temps

Etablir une équation d'évolution pour la fonction de distribution à une particule f dans un gaz dilué consiste à obtenir une expression de df/dt appropriée à la physique du problème. Dans la quantité écrite sous la forme mathématique de la dérivée df/dt , le symbole dt ne représente pas un intervalle de temps infinitésimal mais un intervalle de temps fini Δt pendant lequel se produit une variation Δf (représentée par df) de la fonction de distribution. Cette variation est due notamment aux collisions se produisant pendant l'intervalle de temps Δt . Celui-ci doit être comparé aux diverses échelles de temps caractéristiques de l'évolution du gaz.

La plus petite de celle-ci est la durée τ_0 d'une collision, temps beaucoup plus petite que le temps de collision τ : $\tau_0 \ll \tau$. Le temps de collision est lui-même en principe très petit devant le temps de relaxation τ_r vers un équilibre local, puisqu'un tel équilibre est le résultat de nombreuses collisions : $\tau \ll \tau_r$. Il existe enfin une dernière échelle de temps notée $\tau_{\text{éq}}$, beaucoup plus longue que τ_r , caractérisant, l'évolution macroscopique du gaz vers l'équilibre thermodynamique global : $\tau_r \ll \tau_{\text{éq}}$.

L'équation de Boltzmann est une équation fermée pour la fonction de distribution à une particule dans un gaz classique dilué. Elle décrit, l'évolution de f sur un intervalle de temps Δt intermédiaire entre τ_0 et τ_r . Cela signifie que pour un tel intervalle de temps, elle permet de calculer $f(t + \Delta t)$ à partir de $f(t)$. Cette étape de l'évolution d'un gaz initialement hors d'équilibre, caractérisée par les inégalités :

$$\tau_0 \ll \Delta t \ll \tau_r \quad (I.11)$$

est appelée l'étape cinétique.

d) Echelles de longueur

Il existe corrélativement au sein du gaz diverses échelles de longueur caractéristiques, notamment la portée r_0 des forces intermoléculaires et le libre parcours moyen l . Le libre parcours moyen est défini comme l'échelle de longueur associée au temps de collision τ . On peut prendre aussi comme estimation de l :

$$l \sim \frac{1}{nr_0^2} \sim \frac{d^3}{r_0^2} \quad (I.12)$$

Le gaz étant dilué, on a $r_0 \ll d$, et, par suite, $d \ll l$. On a donc également $r_0 \ll l$. On doit enfin prendre en compte une dernière échelle de longueur, macroscopique et notée L , caractérisant les dimensions linéaires de la boîte contenant le gaz.

L'équation de Boltzmann met en jeu des distances Δl intermédiaires entre r_0 et l :

$$r_0 \ll \Delta l \ll l \quad (I.13)$$

CHAPITRE II

Equations cinétiques

II.1 Introduction

Pour décrire l'état d'un gaz on peut adopter les méthodes de l'hydrodynamique, c'est-à-dire introduire un certain nombre de grandeurs macroscopiques telles que la densité, la vitesse du fluide, la pression, etc. On peut aussi, pour des études plus fines, tenir compte de la nature moléculaire du fluide, en introduisant des grandeurs telles que les fonctions de distribution des vitesses qui donnent une description microscopique classique du fluide [5].

Pour pouvoir déterminer la fonction de distribution d'un système classique tel qu'un gaz ou un liquide, il est nécessaire de connaître son Hamiltonien. La structure de celui-ci dépend de la nature des interactions entre les particules, ainsi que de la présence éventuelle des champs extérieurs. Nous nous intéressons ici à un système de particules dont les interactions sont limitées aux interactions de paire. Même dans ce cas, la résolution de l'équation de Liouville constitue un problème extrêmement compliqué, principalement parce que la fonction de distribution concerne l'ensemble des particules en interaction.

Cependant, les variables dynamiques intéressantes dans la pratique, par exemple l'énergie cinétique ou l'énergie potentielle du système, sont des sommes de quantités dont chacune fait intervenir les coordonnées et les impulsions d'un très petit nombre de particules. C'est pourquoi l'on introduit des fonctions de distribution réduites (concernant un nombre limité de particules), dont la connaissance suffit à déterminer les valeurs moyenne des variables dynamiques pertinentes. Parmi les fonctions de distribution réduites, celle qui joue le rôle le plus important est la fonction de distribution à une particule. Son évolution se déduit d'une hiérarchie d'équations couplées faisant intervenir successivement les fonctions de distribution réduites à une, deux ...particules.

Ace stade, on est donc amené à proposer des schémas d'approximation permettant d'obtenir, à partir de la hiérarchie d'équations couplées pour les fonctions de distribution réduites, une équation d'évolution fermée pour la fonction de distribution à une particule. Diverses équations d'évolution approchées ont ainsi été introduites, chacune étant adaptée à un contexte physique spécifique. Atitre d'exemple, on présente dans ce chapitre l'équation de Vlasov décrivant le début de l'évolution d'un gaz ionisé à partir d'un état initial hors d'équilibre [6] ainsi que l'équation de Boltzmann qui décrit l'évolution de la fonction de distribution en présence de collision.

II.2 Equation de Liouville d'un gaz pur

II.2.1 Densité dans l'espace des phases

Soit N le nombre des particules du système, si le gaz est un corps pur, ce sont N molécules identiques que nous numérotons de 1 à N . Nous les considérons comme des particules ponctuelles : l'état de chacune d'entre elles est défini par un vecteur position \vec{r} et un vecteur vitesse \vec{v} .

L'état (ou phase) du système à un instant t est donc défini par la donnée de l'ensemble des vecteurs :

$$\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \dots, \vec{r}_N \quad (\text{II.1})$$

$$\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \dots, \vec{v}_N \quad (\text{II.2})$$

Cet ensemble définit un point dans un espace à $6N$ dimensions appelé espace de phase. La connaissance exacte de ces $6N$ paramètres est impossible pour des raisons pratiques (grande valeur de N) et fondamentales (indéterminations quantiques). Nous nous contenterons donc au mieux de définir une densité de probabilité :

$$D(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \dots, \vec{v}_N, t) \quad (\text{II.3})$$

En appelant par définition :

$$D dr_1 dr_2 \dots dr_N dv_1 dv_2 \dots dv_N \quad (\text{II.4})$$

la probabilité que la phase du système soit à l'instant considéré à l'intérieur d'un élément de volume à $6N$ dimensions :

$$dr_1 dr_2 \dots dr_N dv_1 dv_2 \dots dv_N \quad (\text{II.5})$$

situé au voisinage du point $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \dots, \vec{v}_N$.

En langage plus physique, la probabilité (II.4) est celle des états du système pour lesquels la particule 1 se trouve à l'intérieur d'un petit élément de volume de l'espace ordinaire :

$$dr_1 = dx_1 dy_1 dz_1 \quad (\text{II.6})$$

et possède un vecteur vitesse dont l'extrémité se trouve à l'intérieur du petit élément de volume de l'espace des vitesses :

$$dv_1 = dv_{1x} dv_{1y} dv_{1z} \quad (\text{II.7})$$

en même temps que la particule 2 se trouve à l'intérieur de l'élément de volume dr_2 avec un vecteur vitesse dont l'extrémité est dans dv_2 , et ainsi de suite, jusqu'à la particule N .

La probabilité totale de trouver le système dans un état quelconque étant égale à l'unité, on a :

$$\int D dr_1 dr_2 \dots dr_N dv_1 dv_2 \dots dv_N = 1 \quad (\text{II.8})$$

Dans cette formule, les intégrations sur les variables \vec{r} sont étendues au volume V occupé par le gaz et celles sur les variables \vec{v} à la totalité de l'espace des vitesses.

On dit qu'il n'y a pas de corrélations entre les particules quand la fonction D est un produit de N fonctions relatives chacune à l'une des particules, c'est-à-dire quand on a :

$$D = D_0(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) \cdot D_0(\vec{r}_2, \vec{v}_2, t) \dots \dots D_0(\vec{r}_N, \vec{v}_N, t) \quad (\text{II.9})$$

Toutes les fonctions individuelles ont été prises formellement identiques et notées D_0 ; cette identité est imposée par l'indiscernabilité des particules.

On dit au contraire qu'il y a des corrélations entre les particules quand la fonction D n'obéit pas à l'équation (II.9).

II.2.2 Equation de Liouville pour des variables conjuguées

Comme toutes les grandeurs cinétiques et hydrodynamiques dérivent de la densité en phase D , nous commençons par rappeler l'équation dite de Liouville, qui régit l'évolution de cette fonction.

En fait, celle-ci ne s'écrit simplement que si les variables décrivant l'état du système sont des variables canoniques conjuguées au sens de Hamilton. C'est pourquoi nous changeons d'abord légèrement la définition de la densité en phase de la façon suivante : désignons par q_1, q_2, \dots, q_{3N} ; p_1, p_2, \dots, p_{3N} une suite de variables scalaires conjuguées que nous écrivons en abrégé (q_i, p_i) , décrivant l'état du système, et par :

$$D(q_i, p_i, t) d\Gamma \quad (\text{II.10})$$

avec :

$$d\Gamma = dq_1 dq_2 \dots dq_{3N} dp_1 dp_2 \dots dp_{3N}$$

la probabilité que le point représentatif du système soit dans l'élément de volume $d\Gamma$ de ce nouvel espace des phases (q_i, p_i) . Soit $H(q_i, p_i)$ l'hamiltonien du système exprimé en fonction de ces variables canoniques. Les équations du mouvement de Hamilton-Jacobi s'écrivent :

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (\text{II.11})$$

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (\text{II.12})$$

Supposons qu'à l'instant t , le système ait son point représentatif à l'intérieur d'un élément de volume $d\Gamma$ de l'espace des phases. Si on considère un point représentatif quelconque de $d\Gamma$, il lui correspond une trajectoire parfaitement définie. A l'instant t' on peut considérer la nouvelle position qu'a pris chaque point représentatif en suivant sa trajectoire: l'ensemble de ces positions remplit un élément de volume $d\Gamma'$ de l'espace des phases. Par différentiation des équations de Hamilton-Jacobi (II.11), (II.12) on établit facilement le théorème de Liouville qui exprime la conservation du volume de l'espace des phases lors de l'évolution du système, soit:

$$d\Gamma = d\Gamma' \quad (\text{II.13})$$

On peut alors remarquer que, puisque les points représentatifs de $d\Gamma$ se retrouvent dans $d\Gamma'$, la probabilité de trouver le système dans $d\Gamma'$ à l'instant t' est égale à celle que l'on avait à l'instant t de la trouver dans $d\Gamma$, soit:

$$D(q'_i, p'_i, t) d\Gamma' = D(q_i, p_i, t) d\Gamma \quad (\text{II.14})$$

d'où, compte tenu de (II.13) :

$$D(q'_i, p'_i, t) = D(q_i, p_i, t) \quad (\text{II.15})$$

On dit que D se conserve en suivant le mouvement, ce qu'on écrit:

$$\frac{dD}{dt} = 0 \quad (\text{II.16})$$

ou plus explicitement en utilisant les dérivées partielles de D à l'instant t :

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \sum_{i=1}^{3N} \frac{dq_i}{dt} \cdot \frac{\partial D}{\partial q_i} + \sum_{i=1}^{3N} \frac{dp_i}{dt} \cdot \frac{\partial D}{\partial p_i} = 0 \quad (\text{II.17})$$

On peut maintenant revenir aux variables \vec{r}_i et \vec{v}_i et écrire l'équation de Liouville relative à la fonction D usuelle. Pour commencer, on suppose que les vitesses des particules sont

faibles devant la vitesse de la lumière, et que toutes les forces agissant sur elles sont indépendantes de la vitesse et dérivent de potentiels. On peut alors écrire l'hamiltonien du système sous la forme :

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_i \varphi_i + \sum \sum_{j \neq i} \varphi_{ij} \quad (\text{II.18})$$

avec :

$$\vec{p}_i = m\vec{v}_i \quad (\text{II.19})$$

φ_i est l'énergie potentielle de la particule i du fait d'un champ de forces extérieures, et φ_{ij} l'énergie potentielle d'interaction des particules i et j .

par dérivation on obtient par exemple :

$$\frac{\partial H}{\partial p_{ix}} = v_{ix} = \frac{dx_i}{dt} \quad (\text{II.20})$$

$$\frac{\partial H}{\partial x_i} = \frac{\partial \varphi_i}{\partial x_i} + \sum_j \frac{\partial \varphi_{ij}}{\partial x_i} = -X_{ix} - \sum_{j \neq i} X_{ijx} = -\frac{dp_{ix}}{dt} \quad (\text{II.21})$$

En désignant par $\vec{X}_i + \sum_{i \neq j} \vec{X}_{ij}$ la force totale agissant sur la particule i .

Donc on peut écrire l'équation de Liouville (II.17) sous la forme suivante :

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \cdot \frac{\partial D}{\partial \vec{r}_i} + \sum_i \frac{\vec{X}_i + \sum_{j \neq i} \vec{X}_{ij}}{m} \cdot \frac{\partial D}{\partial \vec{v}_i} = 0 \quad (\text{II.22})$$

Où : \vec{X}_i est la force due aux potentiels scalaire et vecteur.

\vec{X}_{ij} est la force due au potentiel d'interaction de paire.

II.3 Système d'équations de BBGKY

II.3.1 Fonction de distribution et densité simples

La fonction D contient le maximum d'information que l'on puisse avoir sur le fluide; en fait, on ne peut jamais atteindre ce maximum et l'on doit se contenter de fonctions décrivant moins finement l'état du fluide.

Cherchons donc, la probabilité des états du système dans lesquels la particule 1 est à l'intérieur de l'élément de volume dr_1 et possède un vecteur vitesse dont l'extrémité est à l'intérieur de l'élément de volume dv_1 , les états des particules 2,3, ...,N étant par contre absolument quelconques. On obtient évidemment cette probabilité en intégrant la probabilité élémentaire sur tous les espaces des positions $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N$ (limités au volume V) et sur tous les espaces des vitesses $\vec{v}_1, \vec{v}_2, \dots, \vec{v}_N$ ce qui s'écrit :

$$dr_1 dv_1 \int D dr_2 dv_2 \dots dr_N dv_N \quad (\text{II.23})$$

Il faut d'ailleurs noter que la numérotation des particules introduite pour définir D est artificielle et arbitraire, puisque les particules sont indiscernables. La probabilité pour qu'une autre particule 2,3,..., N se trouve dans le même domaine dr_1, dv_1 est égale à celle calculée ci-dessus.

Il est donc souhaitable d'éliminer la numérotation choisie en définissant le nombre probable $\langle dN \rangle_1$ de particules se trouvant à l'intérieur de l'élément de volume dr_1 avec un vecteur vitesse dont l'extrémité est à l'intérieur de l'élément de volume dv_1 . Ce nombre est égal à la probabilité (II.23), valable pour l'une quelconque des particules, multipliée par le nombre de particules, ce qu'on peut écrire :

$$\langle dN \rangle_1 = f_1 dr_1 dv_1 \quad (\text{II.24})$$

en posant :

$$f_1 = N \int D dr_2 dv_2 \dots dr_N dv_N \quad (\text{II.25})$$

La fonction f_1 est appelée fonction de distribution simple des vitesses. C'est la grandeur la plus généralement utilisée en théorie cinétique des fluides. On confond d'ailleurs souvent dans la formule (II.24) la valeur probable $\langle dN \rangle_1$ avec la valeur réelle dN_1 du nombre de particules situées dans $dr_1 dv_1$. Cette identification est raisonnable si le volume $dr_1 dv_1$, quoique physiquement petit, est encore assez grand pour que $\langle dN \rangle_1$ soit grand. Si l'on néglige les fluctuations statistiques, on peut alors poser :

$$dN_1 = \langle dN \rangle_1 \quad (\text{II.26})$$

A priori, f_1 est une fonction de \vec{r}_1, \vec{v}_1 et t . Si elle ne dépend pas effectivement de \vec{r}_1 on dira que le gaz est *homogène*. D'autre part, la fonction de distribution simple peut être isotrope dans l'espace des vitesses, ou anisotrope. On dira qu'elle est *anisotrope* si elle dépend de l'orientation du vecteur \vec{v} . On dira qu'elle est *isotrope* si elle n'est fonction que de la valeur absolue de ce vecteur.

La fonction obtenue par intégration de f_1 sur tout l'espace des vitesses : $n_1(\vec{r}_1, t) = \int f_1 dv_1$

est la densité simple; elle permet de calculer le nombre probable $\langle dN' \rangle_1$ de particules situées dans l'élément de volume dr_1 avec une vitesse quelconque, au moyen de la formule :

$$\langle dN' \rangle_1 = n_1 dr_1 \quad (\text{II.27})$$

II.3.2 Fonction de distribution et densité doubles

Considérons maintenant deux éléments de volume dr_1 et dr_2 dans l'espace ordinaire, et deux éléments de volume dv_1 et dv_2 dans l'espace des vitesses, et cherchons le nombre probable de couples de particules tels que la première particule du couple soit située dans le volume dr_1 avec l'extrémité de son vecteur vitesse dans dv_1 , cependant que la deuxième est dans dr_2 avec l'extrémité de son vecteur vitesse dans $d\vec{v}_2$. Ce nombre probable $\langle dN \rangle_{12}$ est égal à la probabilité que le système soit dans un état tel que deux particules déterminées, par exemple les particules 1 et 2 satisfassent aux conditions imposées, multipliée par le nombre de couples possibles, soit $N(N-1)$; on peut donc écrire :

$$\langle dN \rangle_{12} = f_{12} dr_1 dv_1 dr_2 dv_2 \quad (\text{II.28})$$

en posant :

$$f_{12} = N(N-1) \int D dr_3 dv_3 \dots dr_N dv_N \quad (\text{II.29})$$

La fonction f_{12} est appelée fonction de distribution double. Par intégration sur les vitesses on définit la densité double :

$$n_{12} = \int f_{12} dv_1 dv_2 \quad (\text{II.30})$$

S'il n'y a pas de corrélations et N étant supposé très élevé on a donc approximativement :

$$f_{12} \approx f_1 f_2 \quad (\text{II.31})$$

de même :

$$n_{12} \approx n_1 n_2 \quad (\text{II.32})$$

Si les égalités ci-dessus ne sont pas satisfaites, on dit qu'il y a des corrélations binaires; on s'intéresse généralement surtout aux corrélations de position représentées par la non-identité de n_{12} et $n_1 n_2$. La figure (II-1) représente l'allure des variations du rapport $n_{12}/n_1 n_2$ en fonction de la distance r_{12} pour les molécules d'un liquide; les oscillations de cette courbe représentent une tendance vers un certain ordre à courte distance; la valeur zéro pour $r_{12} = 0$ correspond aux violentes forces de répulsion entre molécules à très courte distance. Au contraire, à très grande distance, les corrélations sont négligeables. On peut appeler longueur de corrélation une longueur L_c telle que pour $r_{12} > L_c$ on ait $n_{12} \approx n_1 n_2$.

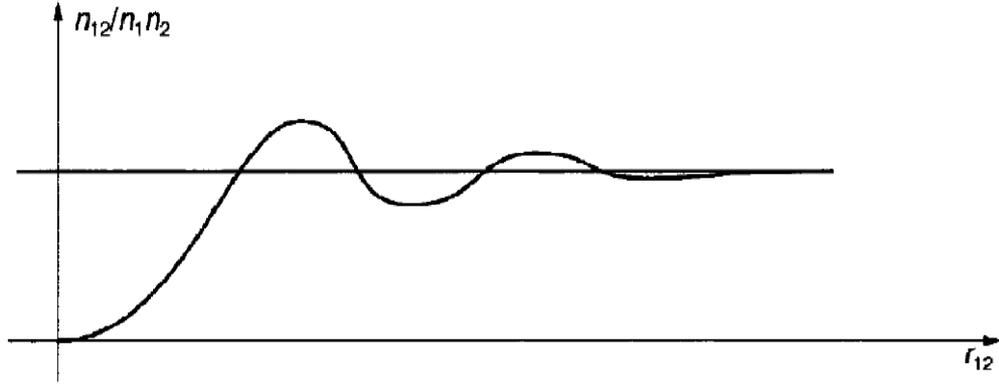


Figure (II-1) : Corrélations binaires de position dans un liquide.

II.3.3 Fonctions de distribution et densités multiples

Les définitions données ci-dessous se généralisent facilement. A partir de D on peut définir la fonction de distribution et la densité triples :

$$f_{123} = N(N-1)(N-2) \int D dr_4 dv_4 \dots dr_N dv_N \quad (\text{II.33})$$

$$n_{123} = \int f_{123} dv_1 dv_2 dv_3 \quad (\text{II.34})$$

les fonctions quadruples, etc. La dernière est :

$$f_{12\dots N} = N! D \quad (\text{II.35})$$

II.3.4 Système d'équations de BBGKY

a) Equation d'évolution de f_1

En multipliant l'équation de Liouville (II.22) par N et en l'intégrant sur les variables $\vec{r}_2, \vec{v}_2, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_N$ on obtient l'équation d'évolution de f_1 :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \frac{\vec{X}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} + \int \frac{\vec{X}_{12}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1} dr_2 dv_2 = 0 \quad (\text{II.36})$$

On peut pour discuter la signification des divers termes de cette équation la récrire sous la forme :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = -\vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} - \frac{\vec{X}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} + \beta(f_{12}) \quad (\text{II.37})$$

avec :

$$\beta(f_{12}) = - \int \frac{\vec{X}_{12}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1} dr_2 dv_2 \quad (\text{II.38})$$

Sous cette forme elle exprime que la variation, en un point donné du gaz, de la fonction de distribution est donnée en fonction du temps par la somme de trois termes :

- Le premier terme, $-\vec{v}_1 \cdot \partial f_1 / \partial \vec{r}_1$, exprime l'influence des phénomènes de diffusion; \vec{v}_1 est la vitesse des molécules et $\partial f_1 / \partial \vec{r}_1$ est le gradient de la fonction de distribution dans l'espace des positions. Considérons la figure (II.2) où nous avons représenté un état de fluide dans lequel il existe des molécules dans la région qui a été hachurée, et aucune molécule dans le reste de l'enceinte. Du fait des vitesses des molécules représentées par des flèches sur cette même figure, cet état va évoluer, les molécules vont diffuser vers les régions vides, et au bout d'un certain temps le gaz tendra vers un état homogène. Le terme de diffusion écrit dans l'équation (II.37) est l'expression mathématique de ce phénomène ; il s'annule si la vitesse des molécules est nulle, ou si le gradient dans l'espace des positions est nul.
- Le deuxième terme, $-(\vec{X}_1/m) \cdot \partial f_1 / \partial \vec{v}_1$, exprime l'action des forces appliquées. \vec{X}_1/m est l'accélération qui est imposée aux molécules par des forces d'origine extérieure au gaz, c'est-à-dire le rapport de la force extérieure agissant sur une molécule à la masse de celle-ci ; par exemple, si la seule force appliquée est la pesanteur, \vec{X}_1/m est un vecteur dirigé verticalement vers le bas et égal à l'accélération de la pesanteur. Si les molécules sont électriquement chargées (charge q) et placées dans un champ électrique \vec{E} , on a :

$$\vec{X}_1/m = q \vec{E}/m \quad (\text{II.38})$$

$\partial f_1 / \partial \vec{v}_1$ est le gradient de la fonction f_1 dans l'espace des vitesses; sous l'action des forces imposées, les vitesses des molécules varient; ces forces tendent donc à faire varier la fonction de distribution des vitesses. Le terme correspondant s'annule donc si \vec{X}_1 est égal à zéro; il s'annulerait si $\partial f_1 / \partial \vec{v}_1$ était nul, ce qui voudrait dire que dans l'espace des vitesses, les molécules seraient réparties uniformément; l'action des forces extérieures aurait alors pour conséquence d'effectuer une translation des axes de cet espace; ceci ne donnerait aucun changement à l'expression de f_1 si f_1 était indépendant du vecteur \vec{v} .

- Enfin, le troisième terme β représente, de façon non explicite ici, l'influence des interactions entre particules.

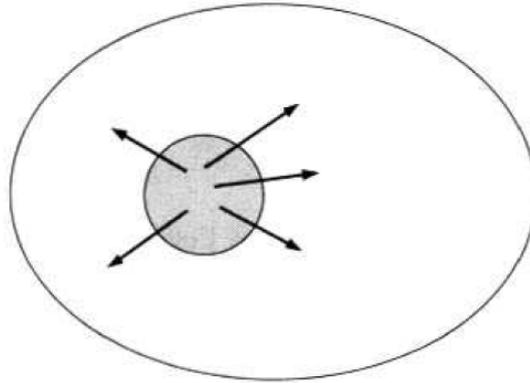


Figure (II-2) : Evolution de f_1 par diffusion.

b) Equation d'évolution de f_{12}

En effectuant le même calcul, mais avec une intégration de moins, on peut obtenir l'équation d'évolution suivante pour f_{12} :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_{12}}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{r}_1} + \vec{v}_2 \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{r}_2} + \frac{\vec{X}_1 + \vec{X}_{12}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1} + \frac{\vec{X}_2 + \vec{X}_{21}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_2} + \int \frac{\vec{X}_{13}}{m} \cdot \frac{\partial f_{123}}{\partial \vec{v}_1} dr_3 dv_3 + \\ \int \frac{\vec{X}_{13}}{m} \cdot \frac{\partial f_{123}}{\partial \vec{v}_1} dr_3 dv_3 + \int \frac{\vec{X}_{123}}{m} \cdot \frac{\partial f_{123}}{\partial \vec{v}_2} dr_3 dv_3 = 0 \end{aligned} \quad (\text{II.39})$$

où les deux derniers termes représentent l'effet des interactions triples.

c) Système d'équations de BBGKY. Méthodes de fermeture

Les équations (II.36) et (II.39) forment un système indéterminé; la première ne permet de déterminer f_1 que si on connaît f_{12} et la deuxième de déterminer f_{12} que si on connaît f_{123} . On pourrait écrire une équation d'évolution pour f_{123} , mais elle ferait apparaître f_{1234} , etc.

A partir de l'équation de Liouville, on obtient donc, par la méthode ci-dessus, dite méthode "régressive", un système de N équations plus simples, mais couplées de proche en proche; ce système est appelé système de Born-Bogolioubov-Green-Kirkwood-Yvon, ou plus simplement système BBGKY. Pour pouvoir l'utiliser pratiquement, il faut l'arrêter à un stade quelconque, en faisant une hypothèse simplificatrice sur l'une des fonctions de distribution, d'ordre plus ou moins élevé. On arrive ainsi à obtenir un système déterminé.

Les méthodes de fermeture les plus simples du système BBGKY. Proposées par divers auteurs conduisent à donner des expressions approchées de $\beta(f_{12})$ dans lesquelles ne figure plus que la fonction de distribution f_1 ; les diverses équations d'évolution ainsi obtenues correspondent à des approximations différentes et s'appellent :

- équation de Boltzmann sans second membre
- équation de Liouville à une particule
- équation de Vlasov
- équation de Boltzmann
- équation de Fokker-Planck
- équation de Landau, Rosenbluth, Mac Donald et Judd
- équation de Balescu

Les plus importantes de ces équations sont l'équation de Boltzmann et l'équation de Vlasov: l'équation de Boltzmann s'applique aux gaz neutres ou faiblement ionisés (collisions binaires dominantes) et l'équation de Vlasov aux plasmas (interactions collectives dominantes). Les quatre suivantes sont des variantes plus sophistiquées de l'équation cinétique des plasmas qui tiennent compte des collisions coulombiennes en plus des interactions collectives décrites par l'approximation de Vlasov.

II.4 Equations cinétiques d'un gaz pur

II.4.1 Equation de Liouville à une particule

L'approximation la plus simple et la plus brutale que l'on peut faire dans (II.36) consiste à négliger purement et simplement les interactions entre particules. En faisant donc $\beta(f_{12}) = 0$ on peut l'écrire sous la forme :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \frac{\vec{X}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} = 0 \quad (\text{II.40})$$

L'équation ainsi écrite est l'équation de Boltzmann sans second membre; elle est d'ailleurs formellement identique à une équation de Liouville à une seule particule. Elle est utile pour décrire l'évolution d'un gaz de particules chargées dans un champ électromagnétique d'origine extérieure; elle suppose évidemment que les particules sont en densité assez faible pour ne pas modifier ce champ extérieur; elle ne fournit pas plus d'informations que l'étude générale des trajectoires des particules, mais elle permet de traiter statistiquement un grand nombre de trajectoires correspondant à des conditions

initiales différentes. La distribution de ces conditions initiales est représentée par les valeurs de $f_1(\vec{r}_1, \vec{v}_1)$ à l'instant initial.

L'équation de Boltzmann sans second membre est utilisée notamment dans les domaines suivants :

- trajectoires des particules dans la magnétosphère;
- accélérateurs de particules, sources d'ions;
- machines à plasma pour la fusion contrôlée (régimes à basse densité, problèmes d'injection).

II.4.2- Equation de Vlasov

Quand la densité des particules est telle que l'on ne peut plus négliger les interactions, l'hypothèse la plus simple que l'on puisse faire consiste à négliger les corrélations entre particules. Dans $\beta(f_{12})$ on peut alors poser :

$$f_{12} = f_1 f_2 \quad (II.41)$$

Nous avons vu que cette approximation est toujours valable si les points 1 et 2 sont assez éloignés l'un de l'autre. L'introduction de la condition ci-dessus dans $\beta(f_{12})$ revient à ne tenir compte, dans la dynamique du plasma, que des interactions lointaines collectives.

En supposant de plus que le plasma est non relativiste on peut ne retenir dans \vec{X}_{12} que les interactions électrostatiques; \vec{X}_{12} ne dépendant donc pas des vitesses on obtient en combinant (II.37) et (II.38) :

$$\beta(f_{12}) = -\frac{\partial f_1}{\partial v_1} \cdot \int n_2 \frac{\vec{X}_{12}}{m} dr_2 = -\frac{q}{m} \vec{E}_1' \cdot \frac{\partial f_1}{\partial v_1} \quad (II.42)$$

\vec{E}_1' étant le champ de charge d'espace défini par la formule:

$$\vec{E}_1' = \int n_2 \vec{X}_{12} dr_2 \quad (II.43)$$

En reportant (II.42) dans (II.36), on obtient finalement :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \frac{q}{m} [\vec{E}_1 + \vec{E}_1' + \vec{v}_1 \wedge \vec{B}_1] \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} = 0 \quad (II.44)$$

L'équation ainsi décrite est l'équation de Vlasov. Elle est formellement identique à l'équation de Boltzmann sans second membre, à condition d'inclure, dans les forces appliquées aux particules, les champs macroscopiques produits par le plasma; elle permet donc d'étudier, de façon self-consistante, les mouvements collectifs d'un gaz de particules chargées relativement dense.

L'équation de Vlasov est l'équation cinétique fondamentale de la théorie des plasmas. Physiquement elle consiste à ne tenir compte, dans les interactions qui déterminent les trajectoires des particules, que des interactions collectives, c'est-à-dire de l'action sur chaque particule chargée du champ "moyen" de charge d'espace créée par les autres. Il faut bien souligner qu'une telle équation "self-consistante" est en fait non linéaire: bien que son écriture paraisse semblable à celle de l'équation de Boltzmann sans second membre, elle en diffère par le terme d'interaction $\frac{1}{m} [\vec{E}_1 + \vec{v}_1 \wedge \vec{B}_1] \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1}$ qui est en fait quadratique par rapport à la fonction de distribution des vitesses, comme on le voit en tenant compte de l'expression qui définit \vec{E}_1' .

II.4.2 Equation de Boltzmann

Pour obtenir l'équation de Vlasov, nous avons réduit les phénomènes d'interaction entre particules à des champs collectifs produits par les charges d'espace et les courants. On peut au contraire faire l'hypothèse extrême inverse, que les phénomènes d'interaction sont des collisions binaires et brutales, et qu'entre deux collisions les particules ne sont soumises à aucune force et suivent une trajectoire rectiligne. Ce modèle est celui de la théorie cinétique classique des gaz neutres, et il a permis bien avant l'établissement du système BBGKY d'obtenir pour f_1 l'équation d'évolution dite de Boltzmann.

L'équation de Boltzmann sans collision ou sans seconde membre exprime la conservation du nombre de particules dans un élément de volume de l'espace de phase qui se déplace au cours du temps ($drdv \rightarrow dr'dv'$ lorsque $t \rightarrow t' = t + dt$). A cause des collisions, certaines particules vont sortir de cet élément de volume et d'autres y entrer. En effet, une particule dans $drdv$ peut, après une collision avec une autre particule qui n'appartient pas à cet élément de volume, en sortir ($dr dv \rightarrow dr' dv'$). De même, la collision de particule extérieure à $dr dv$ peut conduire à une particule dans cet élément de volume ($dr' dv' \rightarrow drdv$). L'équation cinétique tenant compte des collisions à deux corps est dénommée *équation de Boltzmann*. Elle s'écrit sous la forme suivante :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \frac{\vec{x}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} = \left(\frac{\partial f_1}{\partial t} \right)_{coll} \quad (II.45)$$

où $(\partial f_1 / \partial t)_{coll}$ est le terme dit de collision (ou d'interaction) de l'équation de Boltzmann : il traduit la variation, du fait des collisions élastiques et inélastiques, du nombre de particules dans l'élément de volume de l'espace des phases centré sur r et v .

l'équation de Boltzmann (II.45) décrit l'évolution de la fonction de distribution des particules dans l'espace des phases sous l'influence, d'une part, des gradients affectant cette distribution et, d'autre part, des forces en présence et des collisions.

On spécifie maintenant le terme de collision pour un gaz dilué avec des collisions binaires. Il est commode d'introduire la notation :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}^+ - \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll}^- \quad (II.46)$$

où $(\partial f / \partial t)_{coll}^+$ est appelé terme entrant, et $(\partial f / \partial t)_{coll}^-$ terme sortant.

La quantité $(\partial f / \partial t)_{coll}^- dr dp$ représente le nombre moyen de molécules effectuant une collision entre les instants t et $t + dt$, l'une des deux molécules se trouvant, avant la collision, dans l'élément de volume $dr dp$ autour du point (r, p) ; de même, la quantité $(\partial f / \partial t)_{coll}^+ dr dp$ représente le nombre moyen de molécules effectuant une collision entre les instants t et $t + dt$, l'une des deux molécules se trouvant, après la collision, dans l'élément de volume $dr dp$ autour du point (r, p) .

Dans le cas des collisions élastiques, l'opérateur de collisions peut s'exprimer sous la forme d'une intégrale (avec les hypothèses de collisions binaires ainsi que de corrélations faibles) [8]:

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{coll} = \sum_{\beta \neq \alpha} \int_{v_\beta} \int_{\Omega} (f'_\alpha f'_\beta - f_\alpha f_\beta) |v_\alpha - v_\beta| \sigma(\Omega) d\Omega dv_\beta \quad (II.47)$$

où f'_α et f'_β sont les fonctions de distribution après collisions, f_α , f_β , avant collision; v_β est la vitesse de la molécule cible avant le choc, v_α , celle de la molécule incidente; $\sigma(\Omega)$ est la section efficace différentielle microscopique de collisions élastiques et $d\Omega$ l'angle solide élémentaire.

Pour une discussion détaillée de terme de collision on pourra consulter les ouvrages [6], [7], [9] et [10].

II.5 Conclusion

D'une manière tout à fait générale, le but d'une théorie cinétique est de trouver l'équation d'évolution ou équation cinétique pour la fonction de distribution à une

particule. Il existe ainsi diverses équations cinétiques, chacune étant relative à un système physique particulier. La forme spécifique des équations cinétiques est déterminée par la nature du système (gaz, solide, liquide, plasma, . . .), la nature des interactions entre les particules (forme du potentiel, intensité et portée des interactions, . . .) et la valeur des paramètres fixant l'état macroscopique du système (densité, température).

Dans le cas des gaz classiques dilués, l'équation cinétique pertinente, qu'il est possible d'établir sous certaines hypothèses, est l'équation de Boltzmann.

CHAPITRE III

Résolution analytique de l'équation de Vlasov

III.1 Introduction

Il est possible pour un système à interaction longue portée que les particules qui le composent interagissent avec les ondes qui s'y propagent : on parle d'interaction ondes-particules. L'amortissement Landau est un exemple classique de ce type de phénomène. Il s'agit d'ailleurs d'un concept de base en physique des plasmas. L'amortissement Landau est un phénomène de relaxation étudié pour la première fois par Lev Davidovich Landau qui explique pourquoi, dans un plasma, les oscillations longitudinales du champ électrique s'amortissent. Pour cela, il a besoin de faire plusieurs hypothèses comme un domaine borné, des perturbations analytiques, . . . il linéarise les équations de Vlasov-Poisson au voisinage d'un état stationnaire stable et homogène, et montre que de petites perturbations sont alors exponentiellement amorties. De manière générale, on peut voir l'amortissement comme un échange d'énergie entre une onde qui parcourt le système et les particules qui le composent.

Nous intéresserons dans ce chapitre à l'étude de cas particuliers où l'on peut obtenir une solution analytique de l'équation de Vlasov tel le problème de l'amortissement Landau.

III.2 Rappels mathématiques

Nous rappelons ici les éléments essentiels nécessaires au calcul de la solution analytique de l'équation de Vlasov-Poisson linéarisée.

III.2.1 Le théorème des résidus

Soit $f(z)$ une fonction à variable complexe, analytique (dérivable) sur un ouvert E , et à valeurs dans \mathbb{C} . Soient z_i les pôles de f .

Le développement de Laurent d'une fonction analytique dans l'espace complexe est donné par :

$$f(z) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} a_n (z - z_0)^n \quad (\text{III.1})$$

On définit le résidu de f en z_j comme le coefficient a_{-1} dans le développement de Laurent de f avec z_j à la place de z_0 .

Lorsque z_j est un pôle simple, cela revient à calculer :

$$\text{Res}(f, z_j) = a_{-1} = \lim_{z \rightarrow z_j} (z - z_j) f(z) \quad (\text{III.2})$$

Pour un pôle d'ordre m , on a la formule :

$$a_{-1} = \frac{1}{(m-1)!} \frac{d^{m-1}}{dz^{m-1}} [(z - z_j)^m f(z)]_{z=z_j} \quad (\text{III.3})$$

On considère ensuite un contour fermé γ de classe C^1 contenu dans E et qui englobe les pôles z_j . On définit l'indice de γ en z_j par :

$$\text{Ind}_\gamma(z_j) = \frac{1}{2i\pi} \int_\gamma \frac{dz}{z - z_j} \quad (\text{III.4})$$

Ce qui correspond en pratique au nombre de passage du contour γ autour du point z_j .

Alors, finalement, le théorème des résidus nous donne :

$$\int_\gamma f(z) dz = 2i\pi \sum_{i=1}^p \text{Res}(f, z_i) \text{Ind}_\gamma(z_i) \quad (\text{III.5})$$

Intuitivement, cela veut dire que l'on peut connaître l'intégrale de f sur un contour fermé si l'on connaît le comportement de f en ses points singuliers que sont ses pôles.

Remarque1 :

En pratique, on va construire des contours qui tournent soit une fois, soit aucune autour d'un pôle donné, de sorte que $\text{Ind}_\gamma(z_i) = 1$ si z_i est à l'intérieure de γ et 0 sinon. La formule des résidus peut alors s'écrire de manière plus simple

$$\int_\gamma f(z) dz = 2i\pi \sum_{j=1}^p \text{Res}(f, z_j) \quad (\text{III.6})$$

La somme est faite uniquement sur les j tels que z_j est à l'intérieur de la courbe γ .

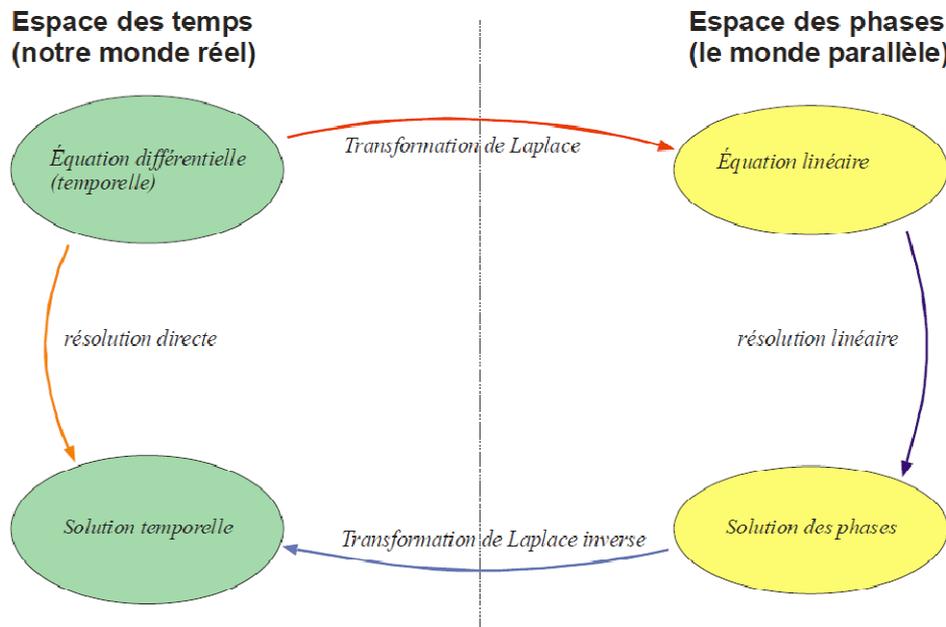
III.2.2 La transformée de Laplace

a) Introduction

La transformée de Laplace permet de convertir une équation différentielle en une équation linéaire où disparaissent les formes dérivées. On se rappellera qu'en posant la solution sous la forme d'une exponentielle, on avait transmuté le problème vers une équation ordinaire dite équation caractéristique. Eh bien! la transformée de Laplace est la généralisation de cette idée.

Une telle pratique permet de transposer le problème de l'espace des temps (notre monde temporel), vers un espace dit des phases (un monde parallèle), de le résoudre

dans cet espace, puis de transposer de nouveau la solution vers le monde réel (l'espace temporel de nouveau). Voici un diagramme de cette transposition :



La transformé de Laplace fait elle-même partie d'une catégorie de **transformations** de la forme :

$$\tilde{f}(s) = \int_{t_1}^{t_2} K(s, t) f(t) dt \quad (\text{III.7})$$

Où $K(s, t)$ est appelé noyau de transformation.

b) Définition

Soit $f \in L^1(\mathbb{R}_+)$ telle qu'il existe des constantes réelles a et b telles que $|f(t)| \leq a e^{bt}$.

Alors

$$\int_0^{+\infty} |e^{-st} f(t)| dt \leq a \int_0^{+\infty} |e^{(b-s)t}| dt < +\infty \quad (\text{III.8})$$

Pour $\Re(s) > b$. On définit dans ce cas pour $s \in \mathbb{C}$ tel que $\Re(s) > b$, la transformée de Laplace $\tilde{f}(s)$ de f par

$$\tilde{f}(s) = \int_0^{+\infty} f(t) e^{-st} dt \quad (\text{III.9})$$

c) Inversion de la transformée de Laplace

Le théorème suivante donne un cadre pratique dans lequel la transformée de Laplace peut être inversée.

Théorème: on suppose qu'il existe deux constantes réelles M et R telles que

- i. \tilde{f} est analytique dans le demi-plan $\Re(s) > R$,
- ii. $|s\tilde{f}(s)| \leq M$ pour tout s tel que $|s| > R$.

Alors si on définit

$$f(t) = \frac{1}{2i\pi} \int_{u-i\infty}^{u+i\infty} \tilde{f}(s)e^{st} ds \quad \forall t > 0, u > R \quad (\text{III.10})$$

$\tilde{f}(s)$ est la transformée de Laplace.

III.2.3 La transformée de Fourier

a) Introduction

Physiquement, dans le cas d'une onde sonore, on peut se représenter les termes d'une série de Fourier comme un ensemble d'harmoniques dont les fréquences forment un ensemble infini mais discret $\{nv\}, n = 1, 2, 3, \dots$ ($v = \omega/2\pi$ est la fréquence du fondamental). En électricité, une tension périodique peut être représentée par une série de Fourier. Celle-ci est une superposition d'un ensemble infini discret de tensions alternatives de fréquences nv . De même, en optique, une lumière constituée d'un ensemble discret de longueurs d'onde $\{\lambda/n\}, n = 1, 2, 3, \dots$, c'est-à-dire un ensemble discret de couleurs, peut être représentée par une série de Fourier.

Deux questions se posent alors: premièrement, est-il possible de représenter une fonction non périodique par quelque chose d'analogue à une série de Fourier? Ensuite, peut-on étendre ou modifier le concept de série de Fourier de manière à inclure le cas d'un spectre continu?

De même qu'à la limite continue, une somme est remplacée par une intégrale, la série de Fourier sera remplacée par une intégrale de Fourier. Celle-ci peut être utilisée pour représenter des fonctions non périodiques, par exemple un son qui n'est pas répété, une impulsion unique de tension, ou un flash de lumière.

L'intégrale de Fourier fait intervenir un spectre continu de fréquences, par exemple un ensemble de sons musicaux ou de couleurs de lumière ou dans un milieu plasma.

b) Transformée de Fourier d'une fonction d'une variable

Soit $g(x)$ une fonction à valeurs réelles ou complexes de la variable réelle x . On appelle transformée de Fourier de $g(x)$ la fonction complexe de la variable réelle k définie par :

$$\hat{g}(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x)e^{-ikx} dx \quad (\text{III.11})$$

En physique, dans la plupart des exemples, la variable concernée est, soit une longueur, soit un temps. Usuellement, la notation x représente une longueur. Dans ce cas, la variable k a les dimensions de l'inverse d'une longueur. Elle est appelée le vecteur d'onde. Lorsque l'on considère une fonction $g(t)$ du temps, on utilise pour la transformée de Fourier de $g(t)$ la notation :

$$\hat{g}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(t)e^{i\omega t} dt \quad (\text{III.12})$$

Où la variable ω , qui a les dimensions de l'inverse d'un temps, est la fréquence angulaire.

Revenons aux notations de l'équation (III.11). Nous donnerons seulement une condition suffisante (mais non nécessaire) d'existence de la transformée de Fourier. Rappelons tout d'abord que, par définition, une fonction g appartient à l'espace \mathcal{L}^1 des fonctions sommables (c'est-à-dire intégrables) si son intégrale, au sens de la théorie des intégrales impropres de Riemann, est absolument convergente, c'est-à-dire si l'on a :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |g(x)| dx < +\infty \quad (\text{III.13})$$

On a le théorème : Toute fonction $g(x)$ de \mathcal{L}^1 (c'est-à-dire intégrable) a une transformée de Fourier. On démontre que celle-ci est continue et bornée, et tend vers 0 lorsque $|k| \rightarrow \infty$.

On peut cependant définir la transformée de Fourier dans d'autres cas.

c) Inversion de la transformation de Fourier

Inversement, on peut en général obtenir $g(x)$ à partir de $\hat{g}(k)$ par la transformation dite de Fourier inverse :

$$g(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{g}(k)e^{ikx} dk \quad (\text{III.14})$$

Remarque 2 :

Les conventions utilisées pour définir la transformation de Fourier (et donc aussi son inverse), c'est-à-dire les conventions utilisées dans les équations (III.11) et (III.14), ne sont pas universelles. En feuilletant différents livres, vous trouverez plusieurs autres conventions. Chacune de ces conventions présente des avantages qui peuvent conduire à la préférer.

III.3 Etude de l'équation de Vlasov-Poisson linéarisée

Dans un certain nombre de situations physiques, on s'intéresse à de petites perturbations d'un plasma à l'équilibre. Considérons notamment les équations de Vlasov-Poisson 1D au voisinage d'un état d'équilibre donné par une fonction de distribution $f_0(x, v)$ pour les électrons et un fond d'ions neutralisant tels que le champ électrique associé soit nul. On se place sur un domaine périodique de période $L = 2\pi/k_0$ en x et sur \mathbb{R} tout entier en v .

En notant $-e$ la charge d'un électron et m sa masse, la fonction de distribution à l'équilibre vérifie les équations de Vlasov-Poisson [31] :

$$\frac{\partial f^0}{\partial t} + v \frac{\partial f^0}{\partial x} - \frac{e}{m} E^0(x) \frac{df^0}{dv} = 0 \quad (\text{III.15})$$

$$\frac{dE^0}{dx} = \frac{e}{\varepsilon_0} (n_0 - \int_{-\infty}^{+\infty} f^0(x, v) dv) \quad (\text{III.16})$$

avec la condition initial $f^0(x, v, t) = f_0(x, v)$ et où $n_0 = \frac{1}{L} \int_0^L \int_{-\infty}^{+\infty} f^0(x, v) dx dv$ est la densité constante du fond d'ions neutralisant. Si f^0 est une solution stationnaire $\frac{\partial f^0}{\partial t} = 0$ et si de plus $E^0 = 0$, il reste dans l'équation de Vlasov $v \frac{\partial f^0}{\partial x} = 0$ pour tout v , ce qui entraîne que $f^0(x, v, t) = f_0(x, v) \equiv f^0(v)$. Toute fonction f^0 dépendant uniquement de v peut donc être une solution d'équilibre. Une solution stable qui correspond à l'équilibre thermodynamique du plasma est le cas où f^0 est une Maxwellienne :

$$f^0(v) = \frac{n_0}{2\pi v_{th}} e^{-\frac{v^2}{2v_{th}^2}} \quad (\text{III.17})$$

où l'on note $v_{th} = \frac{T}{m}$ la vitesse thermique électronique.

On peut maintenant linéariser les équations de Vlasov-Poisson autour de cet état d'équilibre en développant la fonction de distribution et le champ électrique sous la forme de la solution à l'équilibre plus une petite perturbation :

$$f(x, v, t) = f^0(x, v) + \varepsilon f^1(x, v, t), E(x, t) = E^0(x) + \varepsilon E^1(x, t) \text{ (avec } E^0(x) = 0\text{)}.$$

La fonction de distribution f vérifie les équations de Vlasov-Poisson

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{e}{m} E(x) \frac{\partial f}{\partial v} = 0 \quad (\text{III.18})$$

$$\frac{dE}{dx} = \frac{e}{\varepsilon_0} (n_0 - \int_{-\infty}^{+\infty} f(x, v, t) dv) \quad (\text{III.19})$$

avec une condition initiale que l'on suppose de la forme $f_0(x, v) = f^0(v) + \varepsilon f_0^1(x, v)$.

En reportant le développement de f et de E dans les équations (III.18) et (III.19) respectivement on trouve :

$$\varepsilon \left(\frac{\partial f^1}{\partial t} + v \frac{\partial f^1}{\partial x} \right) - \frac{e}{m} (E^0 + \varepsilon E^1) \left(\frac{\partial f^0}{\partial v} + \varepsilon \frac{\partial f^1}{\partial v} \right) = 0 \quad (\text{III.20})$$

$$\varepsilon \frac{dE^1}{dx} = \frac{e}{\varepsilon_0} (n_0 - \int_{-\infty}^{+\infty} (f^0(v) + \varepsilon f^1(x, v, t)) dv) \quad (\text{III.21})$$

En négligeant les termes en ε^2 , on obtient, sachant que $E^0 = 0$

$$\frac{\partial f^1}{\partial t} + v \frac{\partial f^1}{\partial x} - \frac{e}{m} E^1(x) \frac{\partial f^0}{\partial v} = 0 \quad (\text{III.22})$$

$$\frac{dE^1}{dx} = -\frac{e}{\varepsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} f^1(x, v, t) dv \quad (\text{III.23})$$

avec la condition initiale $f^1(x, v, 0) = f_0^1(x, v)$. Comme f_0 est une fonction connue de v , cette équation, dont les inconnues sont f^1 et E^1 , est linéaire et fait apparaître des dérivées partielles en x et en t . On peut donc essayer d'en calculer une solution analytique en utilisant, comme f^1 est périodique en x , une série de Fourier en x et une transformée de Laplace en t . Pour simplifier les notations nous omettrons les indices 1 dans la suite de cette section.

En multipliant (III.22) et (III.23) par e^{-ikx} et en intégrant entre 0 et L , on obtient les relations suivantes de la transformée de Fourier du système de Vlasov-Poisson:

$$\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}(k, v, t) + ikv \hat{f}(k, v, t) - \frac{e}{m} \hat{E}(k, t) \frac{df^0}{dv} = 0 \quad (\text{III.24})$$

$$ik \hat{E}(k, t) = -\frac{e}{\varepsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}(k, v, t) dv \quad (\text{III.25})$$

On a de plus pour la condition initiale $\hat{f}(k, v, 0) = \hat{f}_0(k, v)$. On procède maintenant à la transformée de Laplace en t de ces équations. Pour pouvoir comparer nos résultats à ceux des ouvrages classiques de physique des plasmas, nous adoptons la convention des physiciens de prendre $s = -i\omega$ (avec $\omega \in \mathbb{C}$) par rapport à nos formules données dans la section précédente. La transformée de Laplace d'une fonction $f(t)$ s'écrit alors :

$$\tilde{f}(\omega) = \int_0^{+\infty} f(t) e^{i\omega t} dt \text{ pour } \Re(s) = \Im(\omega) > R \quad (\text{III.26})$$

Et la transformée de Laplace inverse :

$$f(t) = \int_{-\infty+i\mu}^{+\infty+i\mu} \tilde{f}(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (\text{III.27})$$

En multipliant $\frac{\partial \hat{f}}{\partial t}(k, v, t)$ par $e^{i\omega t}$ et en intégrant par rapport à t entre 0 et $+\infty$, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} \frac{\partial \hat{f}}{\partial t}(k, v, t) e^{i\omega t} dt &= [\hat{f}(k, v, t) e^{i\omega t}]_0^{+\infty} - i\omega \int_0^{+\infty} \hat{f}(k, v, t) e^{i\omega t} dt \\ &= -\hat{f}(k, v, 0) - i\omega \tilde{f}(k, v, \omega) \end{aligned}$$

Où l'on note $\tilde{f}(k, v, \omega)$ la transformée de Laplace de $\hat{f}(k, v, t)$. On obtient alors à partir de (III.24) :

$$(-i\omega + ikv)\tilde{f}(k, v, \omega) - \frac{e}{m}\tilde{E}(k, \omega)\frac{df^0}{dv} = \hat{f}_0(k, v) \quad (\text{III.28})$$

et la transformée de Laplace de l'équation de Poisson donne :

$$\tilde{E}(k, \omega) = \frac{ie}{k\varepsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(k, v, \omega) dv \quad (\text{III.29})$$

En reportant (III.28) dans (III.29) on obtient :

$$\begin{aligned} \tilde{E} &= \frac{ie}{k\varepsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{f}_0(k, v) + \frac{e}{m}\tilde{E}\frac{df^0}{dv}}{-i\omega + ikv} dv \\ &= \frac{ie^2}{k\varepsilon_0 m} \tilde{E} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\frac{df^0}{dv}}{-i\omega + ikv} dv + \frac{ie}{k\varepsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{f}_0(k, v)}{-i\omega + ikv} dv \end{aligned}$$

Posons

$$D(k, \omega) = 1 - \frac{e^2}{k^2\varepsilon_0 m} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\frac{df^0}{dv}}{v - \frac{\omega}{k}} dv \quad (\text{III.30})$$

$$N(k, \omega) = \frac{e}{k^2\varepsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{f}_0(k, v)}{v - \frac{\omega}{k}} dv \quad (\text{III.31})$$

On obtient alors l'expression suivante pour \tilde{E} :

$$\tilde{E}(k, \omega) = \frac{N(k, \omega)}{D(k, \omega)} \quad (\text{III.32})$$

Les conditions d'application du théorème d'inversion de la transformée de Laplace sont réalisées si la fonction $\tilde{E}(k, \omega)$ est analytique dans une bande $\Re(s) = \Im(\omega) > R$. On pourra alors utiliser cette expression pour calculer le champ électrique par transformée de Laplace inverse. Remarquons que $D(k, \omega)$ et $N(k, \omega)$ sont bien définis pour $\Im(\omega) > 0$ et sont analytiques dans ce cas à condition que f^0 et f_0 le soient, car l'intégration se fait sur l'axe réel et donc le dénominateur ne s'annule jamais. La transformée de Laplace inverse est donc bien définie. Néanmoins, pour la calculer, il est pratique d'utiliser le théorème des résidus qui nécessite que la fonction intégrer soit analytique en dehors de points isolés. Ce qui est le cas avec l'expression initiale de la transformée de Laplace uniquement dans le demi-plan

$\Im(\omega) > 0$.

Pour pouvoir traiter également le cas de $\Im(\omega) \leq 0$ qui existe physiquement et qui correspond à l'amortissement de la perturbation initiale, nous allons définir un

prolongement analytique de ces fonctions pour $\Im(\omega) \leq 0$. Considérons donc une fonction de la forme :

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g(v)}{v - \frac{\omega}{k}} dv \quad (\text{III.33})$$

Supposons que g est analytique et que les intégrales de contour sont bien définies. Alors, comme v et k sont réels, la fonction $G(\omega)$ est analytique pour $\Im(\omega) > 0$. Notre objectif maintenant est de définir un prolongement analytique de G pour $\Im(\omega) \leq 0$. Pour cela, nous allons modifier la définition de G en modifiant le contour d'intégration qui dans la définition originale est l'axe réel, de sorte que G soit analytique dans le demi-plan $\Im(\omega) > a$, avec $a < 0$ et reste identique à sa valeur originale dans le demi-plan $\Im(\omega) > 0$.

Soit γ l'axe réel paramétré par $v \in [-\infty, +\infty]$. Alors on a

$$G(\omega) = \int_{\gamma} \frac{g(z)}{z - \frac{\omega}{k}} dz \quad (\text{III.34})$$

Pour $\Im(\omega) > 0$ l'intégrale ne présente pas de singularité et donc $G(\omega)$ est analytique.

Comme g tend vers 0 à l'infini, l'intégrale sur deux contours différents allant vers l'infini de chaque côté est identique s'il n'y a pas de pôle entre les deux contours. Les pôles sont $\frac{\omega}{k}$. Pour $\Im(\omega) > 0$, ils sont au-dessus de l'axe réel si $k > 0$ et en-dessous si $k < 0$. Il faut donc distinguer ces deux cas.

Ainsi pour $\Im(\omega) > 0$ et $k > 0$, il n'y a pas de pôle en-dessous de l'axe réel. Donc, en utilisant à la place de l'axe réel n'importe quel droite en dessous de l'axe réel comme contour d'intégration, on peut redéfinir $G(\omega)$ sans changer sa valeur pour $\Im(\omega) > 0$.

Et G définie ainsi va être analytique pour ω strictement au-dessus de la droite choisie, ce qui inclut des ω de partie imaginaire négative. Il en résulte que pour définir un prolongement analytique de $G(\omega)$ pour $\Im(\omega) \leq 0$ dans le cas $k > 0$, il suffit de définir $G(\omega)$ comme une intégrale sur une droite parallèle à l'axe réel qui passe en dessous du pôle ou sur n'importe quelle déformation de cette droite, passant en-dessous du pôle, choisie pour faciliter le calcul de l'intégrale. Les contours choisis en pratique sont représentés sur la figure (III.1). Ainsi, en prenant le contour γ adapté, i.e. la droite réelle pour $\Im(\omega) > 0$, le contour sur la gauche de la figure (III.1) pour $\Im(\omega) = 0$ et le contour sur la droite de la figure (II.1) pour $\Im(\omega) < 0$, la fonction :

$$G(\omega) = \int_{\gamma} \frac{g(z)}{z - \frac{\omega}{k}} dz$$

est analytique dans le plan complexe.

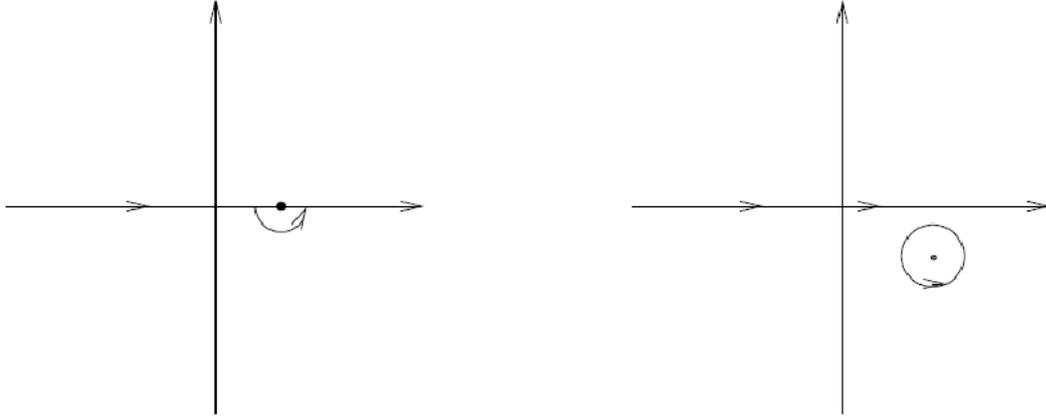


Figure (III.1) : Contour pour pôle sur l'axe réel à gauche et pour pôle en dessous de l'axe réel à droite.

Dans le cas où $k < 0$, on définit de la même manière un prolongement analytique de G pour $\Im(\omega) \leq 0$ à partir de sa valeur pour $\Im(\omega) > 0$ en prenant pour contour d'intégration à la place de la droite réelle, n'importe quelle droite, ou contour adapté, qui passe au-dessus de pôles.

On peut donc de la sorte définir un prolongement analytique de $D(k, \omega)$ et de $N(k, \omega)$ sur tout le plan complexe si nécessaire et exprimer leurs valeurs. En général les fonctions f^0 et f_0 sont des combinaisons linéaires de Maxwelliennes en v . Les fonctions g Maxwelliennes en v jouent donc un rôle essentiel dans le calcul des relations de dispersion. Fried et Conte [20] ont par conséquent introduit la fonction de dispersion d'un plasma, notée Z et définie par :

$$Z_{\pm}(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{\gamma} \frac{e^{-z^2}}{z - \zeta} dz \quad (\text{III.35})$$

où γ , pour Z_- , est n'importe quel contour ouvert parallèle à l'axe réel à l'infini et passant en dessous du pôle $z = \zeta$ ou bien semblable à celui illustré sur la droite de la figure (II.1) et pour Z_+ , est un contour passant au-dessus du pôle.

Proposition : Les fonctions de dispersion du plasma Z_- (resp. Z_+), définies par (II.35) sont indépendantes du contour γ de la forme $t \mapsto t + iu$ pour $|t|$ suffisamment grand et

passant en dessous (resp. au-dessus) du pôle $z = \zeta$. On a de plus les expressions suivantes pour Z_{\pm} :

$$Z_{\pm}(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\text{Pr} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-(u+\zeta)^2}}{u} du \mp i\pi e^{-\zeta^2} \right] \quad (\text{III.36})$$

$$= \sqrt{\pi} e^{-\zeta^2} [\mp i - \text{erfi}(\zeta)] \quad (\text{III.37})$$

Où $\text{erfi}(\zeta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\zeta} e^{t^2} dt$ est la fonction d'erreur complexe.

Notons que pour $b \in \mathbb{R}$

$$\text{Pr} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g(u)}{u-b} du = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left[\int_{-\infty}^{b-\delta} \frac{g(u)}{u-b} du + \int_{b+\delta}^{+\infty} \frac{g(u)}{u-b} du \right]$$

désigne la valeur principale de Cauchy.

Remarque 3:

La fonction d'erreur complexe erfi est une fonction spéciale classique disponible dans les logiciels de calcul formel ou numérique.

Preuve:

Pour démontrer que l'intégrale est indépendante du contour, de la forme donnée, choisi, il suffit de prendre deux contours différents de cette forme. Ces contours sont parallèles à l'axe réel en dehors de $[-A, A]$ pour A assez grand. On peut donc les relier en $-A$ et A par des segments de droite parallèles à l'axe imaginaire de sorte à obtenir un contour fermé. Comme les deux contours choisis sont soit tous les deux en dessous du pôle, soit tous les deux au-dessus, le contour fermé construit ne contient pas de pôle de sorte que l'intégrale sur ce contour est nulle. De plus, vu la forme de la fonction intégrée, il est clair que les intégrales sur les segments de droite parallèles à l'axe imaginaire tendent vers 0 quand $A \rightarrow \infty$. Il en résulte que l'intégrale sur les deux contours initiaux est la même. Pour obtenir l'expression (II.36), on choisit un contour passant par le pôle ζ et le contournant par le bas pour Z_- comme représenté sur le schéma de gauche de la figure (II.1), et par le haut pour Z_+ . Ce contour peut être paramétré par $\gamma_1: t \mapsto t + i\Im(\zeta)$ pour $|t - \Re(\zeta)| \geq \delta$ qui est le même pour Z_- et Z_+ et $\gamma_2: \theta \mapsto \zeta - \delta e^{\mp i\theta}$. Et on a :

$$\int_{\gamma_1} \frac{e^{-z^2}}{z-\zeta} = \int_{-\infty}^{\Re(\zeta)-\delta} \frac{e^{-(t+i\Im(\zeta))^2}}{t+i\Im(\zeta)-\zeta} dt + \int_{\Re(\zeta)+\delta}^{+\infty} \frac{e^{-(t+i\Im(\zeta))^2}}{t+i\Im(\zeta)-\zeta} dt$$

$$= \int_{-\infty}^{\Re(\zeta)-\delta} \frac{e^{-(t+i\Im(\zeta))^2}}{t - \Re(\zeta)} dt + \int_{\Re(\zeta)+\delta}^{+\infty} \frac{e^{-(t+i\Im(\zeta))^2}}{t - \Re(\zeta)} dt$$

en faisant le changement de variables $u = t - \Re(\zeta)$ on trouve :

$$= \int_{-\infty}^{-\delta} \frac{e^{-(u+\zeta)^2}}{u} du + \int_{\delta}^{+\infty} \frac{e^{-(u+\zeta)^2}}{u} du \quad (\text{III.38})$$

Et donc en faisant tendre δ vers 0, on a :

$$\int_{\gamma_1} \frac{e^{-z^2}}{z - \zeta} \rightarrow Pr \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-(u+\zeta)^2}}{u} du$$

D'autre part

$$\int_{\gamma_2} \frac{e^{-z^2}}{z - \zeta} = \int_0^{\pi} \frac{e^{-(\zeta - \delta e^{i\theta})^2}}{-\delta e^{i\theta}} (\pm i \delta e^{i\theta}) d\theta \rightarrow \mp i \pi e^{-\zeta^2} \text{ quand } \delta \rightarrow 0.$$

En sommant les limites des intégrales sur les deux contours, on obtient l'expression (III.36).

On a :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-(u+\zeta)^2}}{u} du &= e^{-\zeta^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|u|^2} e^{-2\zeta u} \frac{du}{u} \\ &= e^{-\zeta^2} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-|u|^2} (e^{-2\zeta u} - e^{2\zeta u}) \frac{du}{u} \\ &= -2e^{-\zeta^2} \int_0^{+\infty} e^{-u^2} \frac{sh(2\zeta u)}{u} du \end{aligned}$$

Notons que comme $sh(2\zeta u) \sim 2\zeta u$ au voisinage de $u = 0$, il n'y a pas de singularité et l'intégrale est donc égale à sa valeur principale de Cauchy. Posons maintenant

$$y(\zeta) = \int_0^{+\infty} e^{-u^2} \frac{sh(2\zeta u)}{u} du$$

Alors

$$y'(\zeta) = 2 \int_0^{+\infty} e^{-u^2} ch(2\zeta u) du$$

et en dérivant puis en intégrant par parties

$$y''(\zeta) = 4 \int_0^{+\infty} e^{-u^2} u sh(2\zeta u) du = 4\zeta \int_0^{+\infty} e^{-u^2} ch(2\zeta u) du = 2\zeta y'(\zeta)$$

Il en résulte que $y'(\zeta) = y'(0)e^{\zeta^2}$. Or $y'(0) = 2 \int_0^{+\infty} e^{-u^2} du = \sqrt{\pi}$. D'où $y'(\zeta) = \sqrt{\pi}e^{\zeta^2}$.

Ensuite, comme $y(0) = 0$, on a

$$y(\zeta) = \sqrt{\pi} \int_0^\zeta e^{x^2} dx = \frac{\pi}{2} \operatorname{erfi}(\zeta)$$

en utilisant la définition $\operatorname{erfi}(\zeta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\zeta e^{x^2} dx$. On en déduit alors l'expression (III.37) à partir (III.38).

On peut maintenant poursuivre le calcul de $D(k, \omega)$. On a

$$f^0(v) = \frac{n_0}{2\pi v_{th}} e^{-\frac{v^2}{2v_{th}^2}}$$

et donc

$$\frac{df^0}{dv}(v) = -\frac{n_0}{\sqrt{2\pi} v_{th}} \frac{v}{v_{th}^2} e^{-\frac{v^2}{2v_{th}^2}}$$

En reportant cette expression dans l'expression de $D(k, \omega)$ (III.30) et en introduisant la fréquence plasma $\omega_p^2 = \frac{n_0 e^2}{\varepsilon_0 m}$, on obtient

$$\begin{aligned} D(k, \omega) &= 1 + \frac{\omega_p^2}{k^2 v_{th}^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi} v_{th}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{v e^{-\frac{v^2}{2v_{th}^2}}}{v - \frac{\omega}{k}} dv \\ &= 1 + \frac{\omega_p^2}{k^2 v_{th}^2} \frac{1}{\sqrt{2\pi} v_{th}} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(v - \frac{\omega}{k}) e^{-\frac{v^2}{2v_{th}^2}}}{v - \frac{\omega}{k}} dv + \frac{\omega}{k} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{v^2}{2v_{th}^2}}}{v - \frac{\omega}{k}} dv \right] \end{aligned}$$

Or

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi} v_{th}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{v^2}{2v_{th}^2}} dv = 1$$

Ensuite en faisant le changement de variable $u = \frac{v}{\sqrt{2} v_{th}}$, il vient

$$D(k, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{k^2 v_{th}^2} \left[1 + \frac{\omega}{k} \frac{1}{\sqrt{2\pi} v_{th}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-u^2}}{u - \frac{\omega}{k\sqrt{2} v_{th}}} dv \right]$$

En utilisant l'expression de la fonction de dispersion du plasma Z cette relation s'écrit

$$D(k, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{k^2 v_{th}^2} \left[1 + \frac{\omega}{\sqrt{2} v_{th} k} Z_{\pm} \left(\frac{\omega}{\sqrt{2} v_{th} k} \right) \right] \quad (\text{III.39})$$

ce qui devient avec l'expression de Z_{\pm} donnée par (III.37)

$$D(k, \omega) = 1 + \frac{\omega_p^2}{k^2 v_{th}^2} \left[1 + \frac{\sqrt{\pi} \omega}{\sqrt{2} v_{th} k} e^{-\frac{\omega^2}{2v_{th}^2 k^2}} \left(\mp i - \operatorname{erfi} \left(\frac{\omega}{\sqrt{2} v_{th} k} \right) \right) \right] \quad (\text{III.40})$$

Nous pouvons maintenant passer de la même manière au calcul de $N(k, \omega)$ en supposant que :

$$f_0^1(x, v) = g \frac{n_0}{\sqrt{2\pi}v_{th}} e^{-\frac{v^2}{2v_{th}^2}}$$

où g est une fonction donnée en général de la forme $g(x) = \cos(kx)$. On a alors

$$\hat{f}_0^1(x, v) = \hat{g}(k) \frac{n_0}{\sqrt{2\pi}v_{th}} e^{-\frac{v^2}{2v_{th}^2}}$$

Puis

$$\begin{aligned} N(k, \omega) &= -\frac{e}{k^2 \varepsilon_0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\hat{f}_0^1}{v - \frac{\omega}{k}} dv \\ &= -\hat{g}(k) \frac{n_0 e}{k^2 \varepsilon_0 \sqrt{2\pi}v_{th}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-\frac{v^2}{2v_{th}^2}}}{v - \frac{\omega}{k}} dv \end{aligned}$$

On fait alors le changement de variable $u = \frac{v}{\sqrt{2}v_{th}}$ pour obtenir

$$N(k, \omega) = -\hat{g}(k) \frac{n_0 e}{k^2 \varepsilon_0 \sqrt{2\pi}v_{th}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-u^2}}{u - \frac{\omega}{\sqrt{2}v_{th}k}} du$$

On reconnaît la fonction de dispersion des plasmas Z_{\pm} et on a donc

$$N(k, \omega) = -\hat{g}(k) \frac{n_0 e}{k^2 \varepsilon_0 \sqrt{2}v_{th}} Z_{\pm} \left(\frac{\omega}{\sqrt{2}v_{th}k} \right) \quad (\text{III.41})$$

Finalement à partir des expressions (III.39) et (III.41), on obtient une formule explicite pour la transformée de Laplace du champ électrique \tilde{E} . On en déduit ensuite le champ électrique à l'aide des formules de transformée de Fourier et de Laplace inverse. En commençant par la transformée de Laplace inverse (III.10), on a

$$\hat{E}(k, t) = \frac{1}{2i\pi} \int_{-\infty+i\epsilon}^{+\infty+i\epsilon} \tilde{E}(k, \omega) e^{-i\omega t} d\omega$$

On peut calculer cette intégrale à l'aide du théorème des résidus en fermant le contour par un demi-cercle vers le bas du plan complexe de rayon tendant vers l'infini. En supposant que $\tilde{E}(k, \omega)$ est analytique en dehors d'un nombre fini de pôles et que l'intégrale sur le demi-cercle tend vers 0 quand le rayon tend vers l'infini, on aura simplement :

$$\hat{E}(k, t) = \sum_j \text{Res}_{\omega=\omega_j}(\tilde{E}(k, \omega)) e^{-i\omega_j t}$$

Où la somme est effectuée sur les pôles, avec :

$$\tilde{E}(k, \omega) = \frac{N(k, \omega)}{D(k, \omega)}$$

et les ω_j sont les racines de $D(k, \omega) = 0$ pour k fixé. Il y a en général plusieurs racines de $D(k, \omega)$. On peut calculer ces racines à l'aide de la fonction `fsolve` de Maple, mais la racine trouvée dépend de l'initialisation choisie, il est donc difficile de toutes les trouver. En pratique seule la racine dominante (i.e. celle de partie imaginaire la plus grande) va persister au cours du temps. Les autres vont devenir très rapidement négligeables. Il suffit donc en pratique de calculer la racine dominante qu'on trouve assez rapidement.

Pour calculer les résidus on peut écrire le développement de Taylor de $D(k, \omega)$ au voisinage de ω_j :

$$D(k, \omega) = D(k, \omega_j) + (\omega - \omega_j) \frac{\partial D}{\partial \omega}(k, \omega_j) + O((\omega - \omega_j)^2)$$

et donc, si ω_j est racine simple, on a $D(k, \omega_j) = 0$ et $\frac{\partial D}{\partial \omega}(k, \omega_j) \neq 0$. Il en résulte que

$$Res_{\omega=\omega_j} \left(\frac{N(k, \omega)}{D(k, \omega)} e^{-i\omega t} \right) = \lim_{\omega \rightarrow \omega_j} \left((\omega - \omega_j) \frac{N(k, \omega)}{D(k, \omega)} e^{-i\omega t} \right) = \frac{N(k, \omega)}{\frac{\partial D}{\partial \omega}(k, \omega)} e^{-i\omega_j t}$$

III.4 Amortissement Landau

L'amortissement Landau est un cas-test pour le système de Vlasov-Poisson 1D. Lorsqu'un plasma se trouvant dans une position d'équilibre et il est perturbé, il revient à sa position d'équilibre suivant une loi exponentielle connue qui est fonction de la perturbation initiale. Si la perturbation est trop importante, le plasma ne revient plus à son état d'équilibre et entre dans une phase où son comportement est non linéaire.

La condition initiale de l'amortissement Landau correspond à :

$$f_0(x, v) = (1 + \varepsilon \cos(kx)) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v^2}{2}} \quad L=4$$

Nous prenons $\varepsilon = 0.001$. Il s'agit physiquement d'une petite perturbation d'un équilibre Maxwellien. Cet équilibre est stable et la fonction de distribution revient à l'équilibre après la perturbation.

On utilise comme perturbation initial [31] :

$$f_0^1(x, v) = \varepsilon \cos(kx) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v^2}{2}}$$

Il en résulte que la perturbation associée de la densité de charge vaut $\rho_0^1 = \int f_0^1(x, v) dv = \varepsilon \cos(kx)$, de sorte que seuls les modes de Fourier -1 et 1 associées à $k = \pm \frac{2\pi}{L}$ sont non nuls et valent $\frac{1}{2}$. Ainsi $g(k)$ apparaissant dans (III.41) vaut $\frac{1}{2}$ pour ces valeurs de k et est nul sinon.

Puis, comme le champ électrique vérifie $\frac{dE}{dx}(x, 0) = \rho_0^1(x)$, on a $E(x, 0) = \frac{\varepsilon}{k} \sin(kx)$ qui a les mêmes modes de Fourier non nuls valant $\frac{1}{2}$ pour $k' = 1$ et $-\frac{1}{2}$ pour $k' = -1$.

Nous avons vu (III.39) :

$$D(k, \omega) = 1 - \frac{1}{2} \frac{\omega_p^2}{k^2 v_{th}^2} Z' \left(\frac{\omega}{\sqrt{2} v_{th} k} \right)$$

et que (III.41) :

$$N(k, \omega) = g(k) \frac{n_0 e}{k^2 \varepsilon_0 \sqrt{2} v_{th}} Z \left(\frac{\omega}{\sqrt{2} v_{th} k} \right)$$

Il en résulte que :

$$\begin{aligned} \frac{N(k, \omega)}{\frac{\partial D}{\partial \omega}(k, \omega)} &= -2g(k) \frac{m}{e} k v_{th}^2 \frac{Z \left(\frac{\omega}{\sqrt{2} v_{th} k} \right)}{Z' \left(\frac{\omega}{\sqrt{2} v_{th} k} \right)} \\ &= -g(k) \frac{m}{e} k v_{th}^2 \frac{Z \left(\frac{\omega}{\sqrt{2} v_{th} k} \right)}{2 \frac{\omega}{\sqrt{2} v_{th} k} - \left(1 - \frac{\omega^2}{v_{th}^2 k^2} \right) Z \left(\frac{\omega}{\sqrt{2} v_{th} k} \right)} \end{aligned}$$

Donnons un tableau des racines dominantes de $D(k, \omega) = 0$ et la valeur de $\frac{N(k, \omega_j)}{\frac{\partial D}{\partial \omega}(k, \omega_j)}$

associée pour plusieurs valeurs de k :

k	ω_j	$\frac{N(k, \omega_j)}{\frac{\partial D}{\partial \omega}(k, \omega_j)}$
0.5	$\pm 1.4156 - 0.1533i$	$0.3677 e^{\pm i 0.536245}$
0.4	$\pm 1.2850 - 0.066i$	$0.449784 e^{\pm i 0.3357725}$
0.3	$\pm 1.1598 - 0.0126i$	$0.63678 e^{\pm i 0.114267}$
0.2	$\pm 1.0640 - 5.510 \times 10^{-5}i$	$1.129664 e^{\pm i 0.00127377}$

Notons $\omega_r = \Re(\omega_j)$, $\omega_i = \Im(\omega_j)$, r l'amplitude de $\frac{N(k, \omega_j)}{\frac{\partial D}{\partial \omega}(k, \omega_j)}$ et φ sa phase. On note qu'on a toujours pour une racine de la forme $\omega_r + i\omega_i$ associée à $re^{i\varphi}$, une racine de la forme $-\omega_r + i\omega_i$ associée à $re^{-i\varphi}$. Donc en ne considérant que les deux racines pour lesquelles ω_i est le plus grand, on a

$$\begin{aligned}\hat{E}(k, t) &\approx re^{i\varphi} e^{-i(\omega_r + i\omega_i)t} + re^{-i\varphi} e^{-i(-\omega_r + i\omega_i)t} \\ &= re^{\omega_i t} (e^{-i(\omega_r t - \varphi)} + e^{i(\omega_r t - \varphi)}) \\ &= 2re^{\omega_i t} \cos(\omega_r t - \varphi)\end{aligned}$$

Ensuite, on trouve :

$$E(x, t) = 4\epsilon r e^{\omega_i t} \sin(kx) \cos(\omega_r t - \varphi)$$

On peut mettre cette formule en application en considérant par exemple la première ligne du tableau, le champ électrique pour $k = 0.5$ est de la forme :

$$E(x, t) = 4\epsilon \times 0.3677 e^{-0.1533 t} \sin(0.5x) \cos(1.4156t - 0.536245)$$

Afin de montrer l'amortissement Landau (décroissance exponentielle des oscillations du champ électrique en fonction du temps), nous avons représenté à partir d'un calcul en Maple sur la figure (III.1) la solution analytique du mode dominant du champ électrique pour $k = 0.4$ tel que $\hat{E}(k, t) = 0.8995 e^{(-0.0661 t)} \cos(1.2850 t - 0.335772)$:

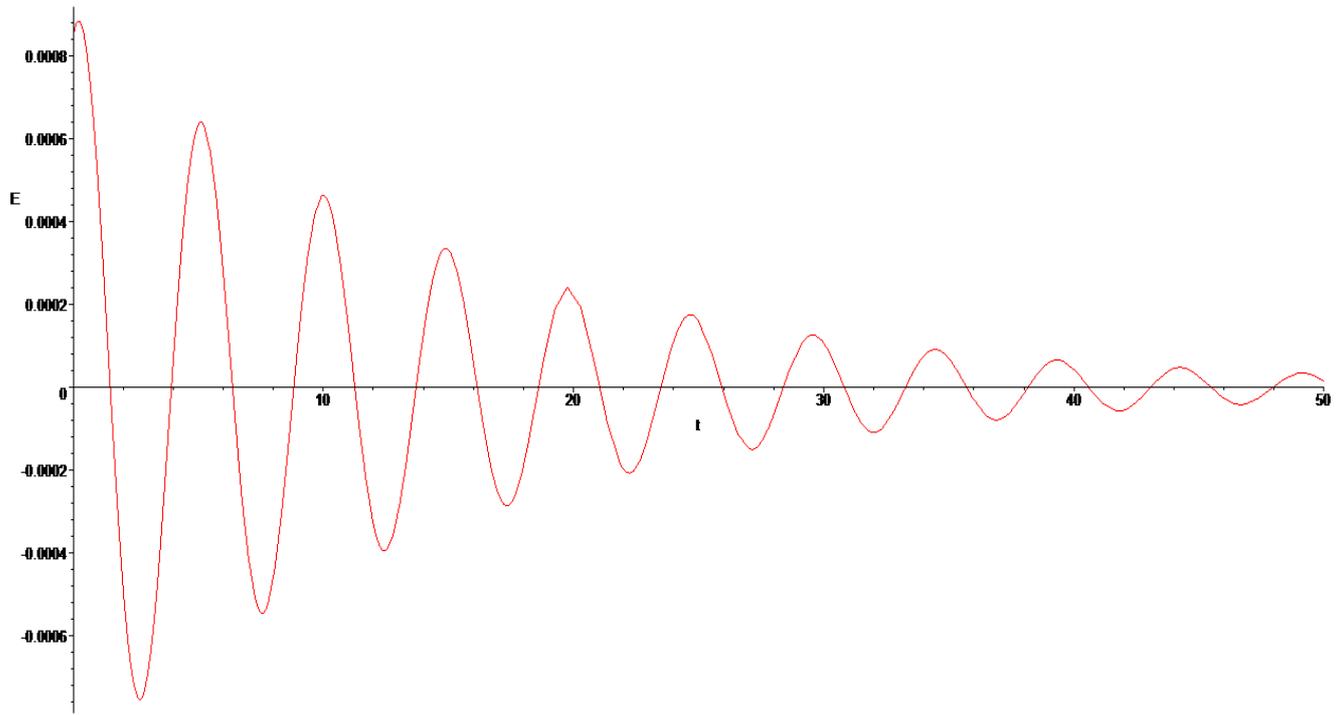


Figure (III-1) : L'amortissement Landau pour $k = 0.4$.

CHAPITRE IV

Méthodes numériques pour la résolution de l'équation de Vlasov et celle de Boltzmann

B) Résolution numérique de l'équation de Vlasov

IV.1 Introduction

A ce jour, deux familles de méthodes numériques sont en compétition dans le cadre de la simulation numérique de modèles cinétiques de type Vlasov : les méthodes Particle-In-Cell (PIC) ou méthodes particulaires, basées sur le calcul des trajectoires d'un nombre fini de particules le long des caractéristiques du système et les méthodes eulériennes, basées sur la discrétisation de la distribution des particules sur un maillage de l'espace des phases. Bien que les méthodes PIC soient peu coûteuses en temps de calcul et en complexité d'implémentation, elles présentent l'inconvénient de générer du bruit numérique lors du couplage de l'équation de Vlasov avec un système d'équations permettant de calculer les champs électromagnétiques auto-consistants sur un maillage de l'espace physique. De plus, ce bruit numérique diminue en $N^{-\frac{1}{2}}$ lorsque le nombre de macro-particules N augmente, ce qui implique donc d'augmenter de façon conséquente le nombre de macro-particules afin de conserver une certaine qualité de résultats. A l'inverse, les méthodes eulériennes et en particulier des méthodes semi-lagrangiennes, génèrent beaucoup moins de bruit numérique lorsque la fonction de distribution est calculée sur un maillage de l'espace des phases; Cependant, elles présentent l'inconvénient majeur d'être très coûteuse en temps de calcul et par conséquent nécessitent parfois d'être parallélisées [7].

IV.2 Les équations de Vlasov-Maxwell et Vlasov-Poisson

IV.2.1 Les équations de Maxwell

Pour caractériser la force gravitationnelle s'exerçant sur un corps, on associe à ce corps une masse; de manière similaire, pour traduire l'état d'électrisation d'un corps on lui associe une charge électrique. L'électromagnétisme est l'étude des phénomènes

électriques et magnétiques provoqués par le mouvement de corps chargés électriquement. Les équations de l'électromagnétisme sont appelées *équations de Maxwell*.

La charge élémentaire est notée e et vaut $1,602 \cdot 10^{-19} \text{ A} \cdot \text{s}$ (Ampère.seconde ou Coulomb=C). L'électron possède une charge électrique q égale à $-e$ et le proton possède une charge $+e$. Les atomes non ionisés sont neutres ($q = 0$).

Tout corps chargé électriquement modifie les caractéristiques physiques de l'espace l'environnant (on dit « toute charge électrique crée un champ électrique ») d'où la création de forces d'attraction ou de répulsion s'exerçant sur deux charges électriques voisines. Ces charges sont alors mises en mouvement par ces forces. Or tout mouvement de charge électrique (qu'on appelle courant) produit un champ magnétique.

Remarque1 : *De la même façon qu'aucune force gravitationnelle ne s'exerce sur un corps de masse nulle, aucune force électrique ne s'exerce sur un corps de charge neutre.*

Dans la suite, nous allons donc considérer quatre champs (donc 4 vecteurs) :

\vec{E} : champ électrique; \vec{D} : champ de déplacement ou induction électrique.

\vec{H} : champ magnétique; \vec{B} : champ d'induction magnétique

IV.2.2 Les équations de Maxwell en 3D

En trois dimensions les équations de Maxwell sont données par :

$$\vec{E}, \vec{D}, \vec{H}, \vec{B}: (t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^3 \mapsto \mathbb{R}^3$$

$$\frac{\partial \vec{D}}{\partial t} - \text{rot} \vec{H} = -\vec{J} \quad (\text{IV.1})$$

$$\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - \text{rot} \vec{E} = \vec{0} \quad (\text{IV.2})$$

$$\text{div} \vec{D} = \rho \quad (\text{IV.3})$$

$$\text{div} \vec{B} = 0 \quad (\text{IV.4})$$

L'équation (IV.1) est appelée équation d'Ampère ou parfois équation d'Ampère-Maxwell, elle signifie qu'une variation du champ électrique crée un champ magnétique. L'équation (IV.2) est appelée équation de Faraday et traduit le fait qu'une variation du champ magnétique crée un champ électrique. L'équation (IV.3) est la loi de Gauss et signifie qu'une charge électrique crée un champ électrique, c'est-à-dire qu'il existe des

monopôles électriques (dits charges électriques). Enfin, l'équation (IV.4), appelée loi de Gauss magnétique traduit le fait qu'il n'existe pas de charge magnétique monopolaire.

$\vec{J}: (t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}^d$ est appelé densité de courant, il est non nul dès qu'il y a déplacement de charges électriques (autrement dit dès qu'il y a courant électrique).

La densité de charge électrostatique notée $\rho: (t, x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^d \mapsto \mathbb{R}^d$ résulte de la présence de charges électriques.

Pour fermer ce système, il faut ajouter des lois de comportement qui décrivent la nature du milieu dans lequel les phénomènes ont lieu. Ces lois de comportement nécessitent des hypothèses sur ce milieu :

1. Milieu parfait : la loi reliant \vec{E} et \vec{D} et \vec{H} et \vec{B} est locale en espace et en temps i.e. $\vec{D}(t, x)$ ne dépend que de $\vec{E}(t, x)$ et $\vec{B}(t, x)$ ne dépend que de $\vec{H}(t, x)$.
2. Milieu isotrope : la loi reliant \vec{E} et \vec{D} et \vec{H} et \vec{B} est indépendante de la direction.
3. En première approximation, ces lois sont linéaires.

Sous ces trois hypothèses, les lois de comportement du milieu s'écrivent alors :

$$\vec{D}(t, x) = \varepsilon(x)\vec{E}(t, x) \quad (\text{IV.5})$$

$$\vec{B}(t, x) = \mu(x)\vec{H}(t, x) \quad (\text{IV.6})$$

La fonction $\varepsilon(x)$ est appelée permittivité électrique ou diélectrique, $\mu(x)$ la perméabilité magnétique.

Si l'on suppose que le milieu est de plus homogène, la permittivité électrique et la perméabilité magnétique sont constantes. Par exemple, le vide est un milieu homogène :

$$\varepsilon(x) \equiv \varepsilon_0 \approx 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ C/V.m}, \quad \mu(x) \equiv \mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ V.s/A.m}$$

Tel que la vitesse de la lumière dans le vide est donnée par : $c_0 = \frac{1}{\varepsilon_0 \mu_0}$ et vaut $3 \cdot 10^8 \text{ m/s}$.

Remarque2 : Un milieu quelconque est souvent caractérisé relativement au vide :

$$\varepsilon(x) \equiv \varepsilon_0 \varepsilon_r(x), \quad \mu(x) \equiv \mu_0 \mu_r(x)$$

On définit alors l'indice du milieu :

$$n(x) = \sqrt{\frac{\varepsilon(x)\mu(x)}{\varepsilon_0\mu_0}} = \sqrt{\varepsilon_r(x)\mu_r(x)}$$

d'où en posant $\varepsilon(x)\mu(x)c^2(x) = 1$, la vitesse de la lumière dans le milieu est donnée par :

$$c(x) = \frac{c_0}{n(x)}$$

D'où l'on déduit que plus l'indice du milieu est élevé, plus les ondes électromagnétiques s'y propagent lentement.

Les équations de Maxwell qui nous intéressent ici, s'écrivent alors dans le vide :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - c_0^2 \operatorname{rot} \vec{B} = -\frac{\vec{J}}{\varepsilon_0} \\ \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} - \operatorname{rot} \vec{E} = \vec{0} \\ \operatorname{div} \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \\ \operatorname{div} \vec{B} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{IV.7})$$

Les équations de Maxwell étant des équations d'évolution, il est évident qu'elles doivent être complétées par des conditions initiales par exemple du type :

$$\vec{E}(0, x) = \vec{E}_0(x), \quad \vec{B}(0, x) = \vec{B}_0(x)$$

De plus, si les équations de Maxwell sont posées dans un domaine borné, il faudra y adjoindre des conditions limites ou conditions de bord.

Les équations de Maxwell avec lesquelles on peut travailler dans le vide:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_x}{\partial t} - c_0^2 \left(\frac{\partial B_z}{\partial y} - \frac{\partial B_y}{\partial z} \right) &= -\frac{J_x}{\varepsilon_0} \\ \frac{\partial E_y}{\partial t} - c_0^2 \left(\frac{\partial B_x}{\partial z} - \frac{\partial B_z}{\partial x} \right) &= -\frac{J_y}{\varepsilon_0} \\ \frac{\partial E_z}{\partial t} - c_0^2 \left(\frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{\partial B_x}{\partial y} \right) &= -\frac{J_z}{\varepsilon_0} \\ \frac{\partial B_x}{\partial t} + \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right) &= 0 \\ \frac{\partial B_y}{\partial t} + \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right) &= 0 \\ \frac{\partial B_z}{\partial t} + \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) &= 0 \\ \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} &= \frac{\rho}{\varepsilon_0} \\ \frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_y}{\partial y} + \frac{\partial B_z}{\partial z} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{IV.8})$$

IV.2.3 Les équations de Maxwell en 2D

Le « système des ondes transverses électriques » correspond à la situation où le champ électromagnétique est invariant par translation dans une direction (par exemple z). On peut penser au cas où le champ est créé par des particules chargées qui ne se déplacent

que dans des plans parallèles à (x, y) . Comme chaque particule $(\vec{x}_i(t), q_i)$ est soumise à une force de Lorentz

$$\vec{F}_i(t) = q_i(\vec{E}(t, \vec{x}_i) + \vec{B}(t, \vec{x}_i) \wedge \vec{v}_i)$$

On voit que \vec{E} et $\vec{B} \times \vec{v}_i$ doivent appartenir au plan (x, y) . Donc :

$$\vec{E}(t, x, y, t) = \vec{E}(t, x, y) = \begin{pmatrix} E_x(t, x, y) \\ E_y(t, x, y) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Et comme $\vec{v}_i = \frac{\partial \vec{x}_i}{\partial t}$ est aussi dans ce plan, on en déduit que \vec{B} est dirigé suivant l'axe z , donc :

$$\vec{B}(t, x, y, t) = \vec{B}(t, x, y) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ B_z(t, x, y) \end{pmatrix}$$

On en déduit la forme suivante pour les équations de Maxwell (IV.8) (toujours dans le vide pour simplifier), appelées alors « Equations de Maxwell 2D » (ou « mode Transverse Electrique », car le champ \vec{E} est alors transverse à la direction d'invariance z) :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_x}{\partial t} - c_0^2 \frac{\partial B_z}{\partial y} &= -\frac{J_x}{\epsilon_0} \\ \frac{\partial E_y}{\partial t} - c_0^2 \frac{\partial B_z}{\partial x} &= -\frac{J_y}{\epsilon_0} \\ \frac{\partial B_z}{\partial t} + \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right) &= 0 \\ \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} &= \frac{\rho}{\epsilon_0} \end{aligned} \quad (IV.9)$$

en rappelant que les fonctions ne dépendent à présent plus que de (t, x, y) , (d'où la disparition de la dernière équation $\frac{\partial B_z}{\partial t} = 0$)

On peut aussi trouver le mode Transverse Magnétique où les rôles de E et B sont inversés :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_z}{\partial t} - c_0^2 \left(\frac{\partial B_y}{\partial x} - \frac{\partial B_x}{\partial y} \right) &= -\frac{J_z}{\epsilon_0} \\ \frac{\partial B_x}{\partial t} + \frac{\partial E_z}{\partial y} &= 0 \\ \frac{\partial B_y}{\partial t} - \frac{\partial E_z}{\partial x} &= 0 \end{aligned} \quad (IV.10)$$

IV.2.4 Du système de Vlasov-Maxwell au système de Vlasov-Poisson

Considérons une particule chargée de charge q et de masse m . Posons $t \mapsto \vec{x}(t)$ et $t \mapsto \vec{v}(t)$ la trajectoire et la vitesse de cette particule. Alors, l'expression de la densité de charge et de courant est respectivement donnée par :

$$\begin{aligned}\rho(x, t) &= q\delta(x - x(t)) \\ \vec{J}(x, t) &= q\vec{v}(t)\delta(x - x(t))\end{aligned}$$

Cette particule crée un champ électromagnétique qui lui-même agit sur la particule en la mettant en mouvement suivant la force de Lorentz suivante :

$$\vec{F}(t) = q(\vec{E}(x, t) + \vec{v}(t) \wedge \vec{B}(x, t))$$

Considérons maintenant N particules chargées de charge q_i , trajectoire $x_i(t)$ et vitesse \vec{v}_i alors l'expression de la charge et de la densité de courant est respectivement donnée par :

$$\begin{aligned}\rho(x, t) &= \sum_{i=1}^N q_i\delta(x - x_i(t)) \\ \vec{J}(x, t) &= \sum_{i=1}^N q_i\vec{v}_i(t)\delta(x - x_i(t))\end{aligned}$$

Mais ne pouvant décrire le mouvement et les interactions de chacune de ces N particules, on considère maintenant le cas d'un ensemble de particules chargées de charge q , trajectoire $x(t)$, vitesse $\vec{v}(t)$ décrit par une fonction de distribution i.e. par une probabilité de présence $f(x, v, t)$ ($f(x, v, t)$ représente la probabilité de trouver des particules dans un élément de volume $dx dv$ au temps t et au point (x, v) de l'espace des phases). Alors cette fonction f , si l'on néglige les collisions entre particules, est solution de l'équation de Vlasov suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_x f + \frac{q}{m} (\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) \cdot \nabla_v f = 0$$

Avec \vec{E} et \vec{B} solutions des équations de Maxwell dans le vide :

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} - c_0^2 \text{rot} \vec{B} &= -\frac{\vec{J}}{\epsilon_0} = -\frac{1}{\epsilon_0} \int_{\mathbb{R}^d} f(x, v, t) \vec{v} dv \\ \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} + \text{rot} \vec{E} &= \vec{0} \\ \text{div} \vec{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0} = \frac{1}{\epsilon_0} \int_{\mathbb{R}^d} f(x, v, t) dv \\ \text{div} \vec{B} &= 0 \end{aligned} \right. \quad (\text{IV.11})$$

Ce système non linéaire est appelé système de Vlasov-Maxwell non relativiste.

Quant au cas relativiste, il est donné par l'équation de Vlasov suivante :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla_x f + \frac{q}{m} (\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) \cdot \nabla_p f = 0$$

Où $p \in \mathbb{R}^3$ est l'impulsion, qui est reliée à la vitesse par :

$$p = m\gamma v \text{ avec } \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - (\frac{v}{c})^2}} = \sqrt{1 + \left(\frac{p}{mc}\right)^2}$$

A partir de ce modèle relativement compliqué, on peut construire une hiérarchie de modèles simplifiés. D'abord, si on suppose que le problème de Maxwell est quasi-stationnaire, c'est-à-dire si l'échelle de variation des champs \vec{E} et \vec{B} est très petite devant les temps considérés, le problème se réduit au système Vlasov-Poisson (il suffit d'annuler les dérivées en temps dans les équations de Maxwell).

Si de plus, on est en présence de particules dont la vitesse est petite devant celle de la lumière alors la densité de courant est petite, donc le champ magnétique \vec{B} est petit et le terme $\vec{v} \wedge \vec{B}$ dans la force de Lorentz est négligeable devant le champ électrique \vec{E} . En supposant $\partial_t = 0$ dans (IV.2) et (IV.3), il reste :

$$\overrightarrow{\text{rot}} \vec{E} = \vec{0}$$

$$\text{div}(\varepsilon \vec{E}) = \rho$$

Comme le champ électrique est à rotationnel nul, dans un domaine suffisamment régulier, il dérive d'un potentiel. Soit donc ϕ , potentiel électrostatique tel que $\vec{E} = -\nabla\phi$. Alors ϕ est solution de :

$$-\text{div}(\varepsilon \nabla\phi) = \rho$$

Dans le cas d'un milieu homogène, le problème devient un problème de Poisson :

$$-\Delta\phi = \frac{\rho}{\varepsilon}$$

IV.2.5 Conservation de la charge

On appelle équation de conservation de la charge, la relation liant la densité de charge au courant :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{j} = 0 \tag{IV.12}$$

Notons alors que la loi de Gauss (IV.3) est conséquence de l'équation de conservation de la charge et de l'équation d'Ampère (IV.1). En effet, en prenant formellement la divergence de l'équation (IV.1), on obtient :

$$\frac{\partial \text{div} \vec{D}}{\partial t} - \text{div} \overrightarrow{\text{rot}} \vec{H} = -\text{div} \vec{j}$$

En utilisant l'équation (IV.12), cette dernière équation devient :

$$\frac{\partial \text{div}(\vec{D} - \rho)}{\partial t} = 0$$

VI.3 La méthode numérique PIC (Particle-In-Cell)

VI.3.1 Introduction

L'équation de Vlasov décrit la dynamique de particules chargées, placées dans un champ électromagnétique, en négligeant l'effet des collisions binaires sur leurs trajectoires. On considère une seule espèce de particules, de masse m et de charge élémentaire q ; ainsi, l'équation de Vlasov, non collisionnelle, non relativiste, s'écrit :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + V \cdot \nabla_X f + \frac{q}{m} (E + V \times B) \cdot \nabla_V f = 0 \quad (\text{IV.13})$$

où, B , E sont les champs magnétique et électrique; t est la variable temporelle; $X = (x; y; z)$ est la position; $V = (V_x, V_y, V_z)$ est la vitesse et $f = f(X, V, t)$ est la fonction de distribution des particules, et c'est l'inconnue de l'équation. Cette fonction représente la densité de particules, qui à l'instant t et au point X , ont une vitesse V ; en d'autre termes, le nombre de particules qui se trouvent, à l'instant t , dans le volume $[X, X + dX] \times [V, V + dV]$ est :

$$dN = f(X, V, t) dX dV \quad (\text{IV.14})$$

Ainsi, à partir de cette fonction, on définit les densités de charge et de courant par les relations suivantes :

$$\begin{cases} \rho(X, t) = q \int_{\mathbb{R}^3} f(X, V, t) dV \\ J(X, t) = q \int_{\mathbb{R}^3} V f(X, V, t) dV \end{cases} \quad (\text{IV.15})$$

IV.3.2 Couplage avec les équations de Maxwell

Pour résoudre l'équation de Vlasov, il est nécessaire de fournir les champs magnétique et électrique, qui sont calculés grâce au système de Maxwell (IV.12). Et pour résoudre ce système, il est nécessaire de connaître la densité de courant, qui est calculée à partir de la fonction de distribution, solution de l'équation de Vlasov.

IV.3.3 approximation particulière de l'équation de Vlasov

Pour résoudre numériquement l'équation de Vlasov, on peut choisir la méthode PIC (Particle In Cell). Cette méthode consiste à approcher la densité de particules à l'aide d'un nombre fini N de macro-particules de poids numériques ω_k , de positions $X_k(t)$ et de vitesses $V_k(t)$, où $k \in \{1 \dots N\}$. Pour cela, on remplace, à chaque instant t , la fonction de distribution par une combinaison linéaire de fonctions de Dirac dans l'espace des phases. On obtient, alors, l'approximation de la fonction de distribution, que l'on note f_N :

$$f_N(X, V, t) = \sum_{k=1}^N \omega_k \delta(X - X_k(t)) \delta(V - V_k(t)) \quad (\text{IV.16})$$

Les densités de charge et de courant sont alors approchées par

$$\begin{cases} \rho_N(X, t) = q \int_{\mathbb{R}^3} f_N(X, V, t) dV = q \sum_{k=1}^N \omega_k \delta(X - X_k(t)) \\ J_N(X, t) = q \int_{\mathbb{R}^3} V f_N(X, V, t) dV = q \sum_{k=1}^N \omega_k V_k(t) \delta(X - X_k(t)) \end{cases} \quad (\text{IV.17})$$

Où, X_k et V_k sont les caractéristiques de l'équation de Vlasov, dont l'évolution est régie par :

$$\begin{cases} \frac{dV_k(t)}{dt} = \frac{q}{m} (E(X_k(t), t) + V_k(t) \times B(X_k(t), t)) \\ \frac{dX_k(t)}{dt} = V_k(t) \end{cases} \quad (\text{IV.18})$$

La résolution numérique de l'équation de Vlasov-Maxwell par la méthode PIC se fait selon les étapes suivantes ([13], [2], [14], [15], [26]) :

On commence par l'initialisation des particules.

Ensuite à chaque pas de temps on fait les opérations suivantes :

- (1) Interpolation des champs aux positions des particules.
- (2) Calcul des nouvelles vitesses et positions des particules.
- (3) Calcul de la densité de courant générée.
- (4) Calcul des champs électromagnétiques.

IV.4 La méthode numérique semi-Lagrangienne

Depuis quelques années avec l'augmentation de la puissance de calcul des ordinateurs, il devient envisageable de résoudre l'équation de Vlasov sur un maillage de l'espace des phases pour d égal à 2. La dimension $d = 3$ est un objectif encore difficile à atteindre non seulement en termes de temps de calcul mais aussi en termes de mémoire et de capacité de stockage.

La méthode semi-lagrangienne consiste à calculer une approximation de la solution de l'équation de Vlasov f sur un maillage de l'espace des phases en utilisant la propriété que la fonction f est conservée le long des caractéristiques. En effet, pour tous temps s et t , on a :

$$f(t, x, v) = f(s, X(s; t, x, v), V(s; t, x, v)) \quad (\text{IV.19})$$

Où $(X(s; t, x, v), V(s; t, x, v))$ sont les caractéristiques de l'équation de Vlasov et sont solutions du système d'équations différentielles ordinaires :

$$\begin{cases} \frac{dx}{ds} = V \\ \frac{dv}{ds} = F(s, X(s), V(s)) \\ X(t) = x \\ V(t) = v \end{cases} \quad (\text{IV.20})$$

Où F est le terme de force dans l'équation (IV.13).

La méthode numérique consiste alors à calculer f^{n+1} (i.e. l'approximation de f au temps t_{n+1}) sur les points d'une grille (x_i, v_j) , $1 \leq i \leq N_x$, $1 \leq j \leq N_v$ de l'espace des phases, en connaissant f_n sur ces mêmes points.

Pour commencer, on se donne un maillage uniforme de l'espace des phases (x_i, v_j) , $1 \leq i \leq N_x$, $1 \leq j \leq N_v$. L'approximation de f au temps t_n étant connue, l'objectif est de calculer

f^{n+1} aux points de la grille (x_i, v_j) .

La méthode comporte deux étapes.

- 1- Une étape d'advection : la remontée de la caractéristique.

Pour tout (i, j) , calculer le pied de la caractéristique finissant en (x_i, v_j) c'est-à-dire une approximation de $(X(t_n; x_i, v_j, t_{n+1}), V(t_n; x_i, v_j, t_{n+1}))$, en résolvant en arrière le système (IV.20).

- 2- Une étape d'interpolation : Comme

$$f^{n+1}(x_i, v_j) = f^n(X(t_n; x_i, v_j, t_{n+1}), V(t_n; x_i, v_j, t_{n+1})) \quad (\text{IV.21})$$

f^{n+1} peut être calculée en interpolant f^n qui est connue aux points de la grille $(X(t_n; x_i, v_j, t_{n+1}), V(t_n; x_i, v_j, t_{n+1}))$.

Pour plus de détails et résultats on peut consulter les documents suivants : [15], [4] et [12].

C) La résolution numérique de l'équation de Boltzmann par Monte Carlo

IV.5 La méthode numérique Monte Carlo (MC)

IV.5.1 Introduction

La méthode numérique dite de Monte-Carlo peut être décrite globalement comme une méthode de simulation statistique qui utilise une séquence de nombres aléatoires pour la réaliser. Elle est très utilisée dans de nombreux domaines, en particulier en physique nucléaire, physique statistique et en statistique. Par ailleurs, elle connaît des variantes en traitement du signal sous l'appellation d'algorithmes d'approximation stochastique [16].

On fait remonter la naissance de la méthode de Monte-Carlo au comte de Buffon qui, en 1777, a décrit une méthode restée célèbre de calcul de π basée sur la réalisation d'expériences répétées. Mais la vraie naissance de cette méthode est liée à l'apparition des premiers ordinateurs et à leur utilisation dans le cadre des projets secrets du département de la défense des Etats-Unis dans les années 40-45 en vue de la conception des premières bombes atomiques. Le nom « Monte-Carlo », qui fait allusion aux jeux de hasard pratiqués à Monte-Carlo, a été inventé en 1947 par Nicholas Metropolis, et publié pour la première fois en 1949 dans un article écrit avec Stanislas Ulam.

La méthode de Monte Carlo doit être opposée aux méthodes conventionnelles de simulation par éléments finis qui utilisent le système d'équations différentielles décrivant le système physique ou mathématique sous-jacent. Dans bien des applications, le processus physique est simulé directement par la méthode de Monte Carlo et il n'y a pas besoin d'écrire le système d'équations différentielles qui décrivent le comportement du système. La seule hypothèse nécessaire est que le système physique ou mathématique peut être décrit par des fonctions de densité de probabilité $p(x)$ où x est un ensemble de variables aléatoires.

Les $p(x)$ connus, la méthode de Monte Carlo procède par échantillonnage en appliquant une série de réalisations x^* des variables aléatoires x . De multiples échantillons sont ainsi calculés et le résultat est obtenu en calculant la moyenne de ces réalisations. Dans

bien des cas, la variance des x^* donne une indication de l'erreur statistique et permet de calculer le nombre de réalisations nécessaires pour obtenir une précision donnée.

L'utilisation de cette méthode en physique des plasmas a permis le développement de modèles particuliers, simulant le comportement du plasma à l'échelle microscopique des collisions, par opposition aux modèles « fluides » qui supposent que le plasma est un milieu continu caractérisable à l'échelle macroscopique par des grandeurs moyennes. La simulation Monte Carlo d'un ensemble d'ions ou d'électrons présents dans un gaz dans lequel ils font des collisions et subissant une force due au champ électrique et magnétique, permet de suivre l'évolution temporelle de ce groupe de particules dans l'espace des phases. Cette méthode est basée sur la génération de nombres aléatoires permettant de recréer un enchaînement d'évènements réels, comme par exemple le mouvement d'une particule accélérée dans un champ électrique et magnétique et faisant des collisions [22]. Plus des détails dans [17], [18], [19], [20], [24], [25] et [26].

Nous allons tout d'abord exposer le principe de la génération de nombres aléatoires. Nous expliquerons ensuite comment ces nombres peuvent être utilisés pour calculer le temps de vol d'une particule entre deux collisions, choisir le type de collision que cette particule doit subir ainsi que la perte d'énergie consécutive.

IV.5.2 Principe de la méthode

La mise en œuvre de la méthode de Monte Carlo pour étudier le transport électronique dans une décharge nécessite la connaissance de la trajectoire et de la vitesse de chaque électron à tout instant t et en tout point r (de coordonnées x, y, z) de l'espace des positions.

Donc à un instant t_0 et pour une position r_0 , un faisceau initial de n_0 électrons primaires de distribution dans l'espace des phases (r, v) connue, est libéré dans le gaz étudié. Ce dernier est défini par les sections efficaces de collision électron-molécule. Les électrons évoluent dans le gaz sous l'action de forces extérieures électrique et magnétique. Durant leur évolution spatio-temporelle, les électrons effectuent des collisions (élastiques et inélastiques) avec les molécules du gaz. La méthode de M-C utilisée est une méthode qui consiste à suivre individuellement les électrons tout au long de leur déplacement dans le

gaz, ensuite une moyenne statistique est effectuée pour obtenir un certain nombre de grandeurs décrivant le comportement moyen des électrons comme par exemple la fonction de distribution ou les paramètres de transport.

Un électron donné est donc suivi à partir de son émission de l'origine (t_0, r_0, v_0) ou de sa création (par un processus d'ionisation) jusqu'à sa disparition (par attachement ou bien par dépassement des limites $t_{max}, r_{max}, v_{max}$ accordées à la simulation). Cet électron pendant un court instant correspond à son temps de vol libre, suit une trajectoire déterministe dans un champ de force. Le temps de vol libre est calculé à partir d'un tirage d'un nombre aléatoire.

La trajectoire de l'électron obéit dans ce cas aux lois de la mécanique classique. Au bout de son temps de vol libre, l'électron effectue une collision qui modifie sa vitesse v et sa direction. Les paramètres de collision (sa nature, les angles de déviation, ...) sont ensuite déterminés par des méthodes stochastiques tenant compte des sections efficaces de collision.

Pour chaque électron on stocke lors des collisions successives un certain nombre d'informations (composantes du vecteur vitesse, coordonnées de l'électron, ...) qui permettent de déterminer la fonction de distribution et les paramètres de transport électroniques.

La simulation est arrêtée lorsque tous les électrons primaires et secondaires sont traités.

IV.5.3 Génération de nombres aléatoires

La génération de nombres aléatoires se fait grâce à des algorithmes simples qui permettent de créer une séquence de nombres rationnels compris entre 0 et 1. Cette séquence est assimilée à une suite $\{R_i\}$ de nombres pseudo-aléatoires qui sont uniformément distribués dans l'intervalle $[0,1]$ ([21], [22]).

L'utilisation de cette suite permet de sélectionner un évènement à partir d'une loi de probabilité $p(x)$, continue ou discrète, reliée au phénomène physique que l'on cherche à simuler. Il faut ainsi, dans le cas où cette loi de probabilité est continue, effectuer une transformation de la distribution uniforme sur l'intervalle $[0,1]$ en une distribution quelconque sur un intervalle $[a, b]$.

Si $p(x)$ est normalisée sur l'intervalle $[a, b]$, c'est à dire si :

$$\int_a^b p(x)dx = 1 \quad (\text{III.22})$$

il est alors possible de déterminer le nombre réel X_i tel que :

$$\int_a^{X_i} p(x)dx = \int_0^{R_i} u(x)dx = R_i \quad (\text{III.23})$$

où $u(x)$ est la distribution uniforme et égale à 1 (dans le cas où l'intervalle est $[0, 1]$) sur laquelle sont tirés les nombres R_i . Parce que la densité de probabilité $p(x)$ est positive, à chaque nombre R_i correspond un nombre X_i unique. L'inconnue X_i du problème physique sera déterminée grâce à la relation (IV.23).

Dans le cas où la loi de probabilité du phénomène physique est une loi discrète, définie par une probabilité $p(e_i)$ d'occurrence de l'événement e_i , et normalisée suivant la relation :

$$\sum_{i=1}^n p(e_i) = 1 \quad (\text{IV.24})$$

Où n est le nombre d'événements possibles, l'événement e_j aura lieu si :

$$\sum_{k=1}^{j-1} p(e_k) < R_i \leq \sum_{k=1}^j p(e_k) \quad (\text{IV.25})$$

IV.5.4 Calcul du temps de vol libre

Nous venons de voir qu'à un instant initial t_0 , n_0 électrons sont libérés dans un gaz ; puis évoluent en effectuant des collisions avec les molécules du gaz sous l'action de forces extérieures. Chaque électron suit une trajectoire déterministe entre deux collisions. L'instant t_1 de la collision (ou le temps de vol libre $t_{vol} = t_1 - t_0$) qui est obtenu par tirage d'un nombre aléatoire est déterminé de la manière suivante :

Soit ν_T la fréquence totale de collision d'une particule, définie par :

$$\nu_T = N\sigma_T\nu_r \quad (\text{IV.26})$$

Où N la densité constante du gaz

σ_T la section efficace totale de collision

ν_r la vitesse relative entre les particule de gaz (égale à $|v_p - v_c|$, v_p et v_c étant respectivement les vitesses de projectile et de la cible).

Si dt est un intervalle de temps infiniment petit, la probabilité que la particule fasse une collision pendant dt est donnée par $\nu_T dt$. A l'inverse, la probabilité de ne pas faire de collision pendant dt est égale à $1 - \nu_T dt$. De plus, définissons $p(t)$ comme étant la probabilité que la particule ne fasse sa première collision qu'après t , sachant que la

condition initiale est $p(t_0 = 0) = 1$. La probabilité pour que la particule fait sa première collision après $t + dt$ est donnée par [22] :

$$p(t + dt) = p(t)(1 - v_T dt) \quad (IV.27)$$

On en déduit que:

$$\frac{dp(t)}{dt} = \frac{p(t+dt)-p(t)}{dt} = -v_T p(t) \quad (IV.28)$$

$$p(t) = \exp\left(-\int_{t_0}^t v_T(t') dt'\right) \quad (IV.29)$$

La densité de probabilité $p'(t)$ pour qu'une particule fasse sa première collision entre les instants t et $t + dt$ est donnée par :

$$p'(t)dt = p(t) - p(t + dt) = -dp(t) \quad (IV.30)$$

Pour connaître l'instant t_1 de la prochaine collision, nous devons tirer un nombre aléatoire R_{vol} , et suivre le principe précédemment exposé dans le cas d'une loi de probabilité continue $p(t)$, en écrivant :

$$R_{vol} = \int_{t_0}^{t_1} p(t') dt' \quad (IV.31)$$

Où t_1 est l'inconnue. On obtient finalement :

$$R_{vol} = \int_{t_0}^{t_1} -dp(t') = p(t_0) - p(t_1) \quad (IV.32)$$

Parce que $p(t_0) = 1$, l'expression finale est de la forme :

$$-\ln(1 - R_{vol}) = \int_{t_0}^{t_1} v_T(t') dt' \quad (IV.33)$$

$v_T(t)$ n'est généralement pas constante dans le temps car elle dépend de la vitesse relative (directement, mais aussi indirectement à travers la section efficace) qui peut varier dans le temps. Sauf dans le cas où les particules simulées ne sont pas accélérées entre deux collisions et que la densité de gaz est constante, il n'est généralement pas possible d'écrire une forme analytique simple de la variation temporelle de $v_T(t)$ entre deux collisions. Lors d'une simulation Monte Carlo, le temps de vol entre deux collisions doit être déterminé un très grand nombre de fois. Il n'est donc pas raisonnable de vouloir résoudre l'équation (IV.33) par le calcul de l'intégrale serait lourdement pénalisant en temps de calcul.

Pour contourner ce problème, nous avons utilisé la technique des collisions nulles ou fictives [23]. En introduisant une collision fictive dans le groupe des événements collisionnels possibles de façon à ce que la fréquence totale de collision soit constante quelque soit l'énergie de la particule, on peut résoudre analytiquement l'équation (IV.33).

Une collision fictive ne change ni la direction, ni le module de la vitesse de la particule. La nouvelle fréquence totale de collision est alors définie par [23]:

$$v'_T = \sum v_{réelles}(\varepsilon) + v_{fictive}(\varepsilon) = \{\sum v_{réelles}(\varepsilon)\}_{max} \quad (IV.34)$$

L'équation (IV.33) peut maintenant s'écrire [23]:

$$t_{vol} = t_1 - t_0 = \frac{1}{v'_T} \ln \left[\frac{1}{1-R_{vol}} \right] \quad (IV.35)$$

En résumé, pour déterminer le temps de vol électronique, il suffit de tirer un nombre aléatoire R_{vol} compris entre 0 et 1 et d'utiliser la relation (IV.35).

IV.5.5 Equations du mouvement de l'électron entre deux collisions successives

Entre deux collisions successives, la trajectoire de l'électron est conditionnée par les champs de force électrique et magnétique régnant dans la décharge. Deux situations distinctes de champs électrique et magnétique uniformes vont être traitées dans ce qui suit [27]:

- Cas d'un champ magnétique perpendiculaire au champ électrique
- Cas d'un champ magnétique parallèle au champ électrique

a) Champ magnétique transversal ($B \perp E$)

Dans le cas d'un électron, de charge $-e$ et masse m , en mouvement dans un champ électrique E et magnétique B , la force de Lorentz s'écrit :

$$\vec{F} = -e(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) \quad (IV.36)$$

Comme le champ électrique est supposé anti parallèle à l'axe Oz ($-E // Oz$) et le champ magnétique parallèle à l'axe Oy ($B // Oy$), les composantes de la force \vec{F} dans le trièdre direct (x, y, z) s'écrivent :

$$F_x = m \frac{dv_x}{dt} = eB v_z \quad (IV.37)$$

$$F_y = m \frac{dv_y}{dt} = 0 \quad (IV.38)$$

$$F_z = m \frac{dv_z}{dt} = eE - eB v_x \quad (IV.39)$$

Ou bien :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{dv_x}{dt} = \omega_c v_z \\ \frac{dv_y}{dt} = 0 \\ \frac{dv_z}{dt} = \frac{e}{m} E - \omega_c v_x \end{array} \right. \quad (IV.40)$$

Avec $\omega_c = \frac{e}{m}B$ étant la fréquence de Larmor ou fréquence cyclotron.

La variation de la vitesse au cours du mouvement libre de l'électron et sa trajectoire se détermine à partir de la résolution des équations du mouvement (IV.40). A partir de l'équation (IV.38), il est facile de voir que la composante v_y de la vitesse reste constante au cours du mouvement libre.

Ceci n'est pas le cas des composantes v_x et v_z (voir équations (IV.37) et (IV.39)). Pour résoudre ces deux équations on effectue le changement de variable suivant :

$$V(t) = v_x(t) + iv_z(t) \text{ avec } i^2 = -1$$

Les équations (IV.37) et (IV.39) deviennent :

$$\frac{dV(t)}{dt} + i\omega_c V(t) = i\frac{e}{m}E \quad (\text{IV.41})$$

La solution de cette équation différentielle du premier ordre entre l'instant initial t_0 (celui de la dernière collision) et un instant t (avant la collision suivante) s'écrit :

$$V(t) = c \exp(-i\omega_c t) + \frac{eE}{m\omega_c} = c \exp(-i\omega_c t) + \frac{E}{B} \quad (\text{IV.42})$$

$$\text{Avec } c = \left(V_0 - \frac{E}{B}\right) \exp(i\omega_c t_0)$$

Cette solution s'écrit à l'instant t_1 de la collision :

$$V(t_1) = \left(V_0 - \frac{E}{B}\right) \exp(-\omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} \quad (\text{IV.43})$$

$$\text{Avec } \Delta t = t_1 - t_0 \text{ et } V_0 = V(t_0) = v_{x0} + iv_{z0}$$

Si on identifie $V(t_1)$ ($=v_{x1} + iv_{z1}$) à l'équation (IV.43), on obtient les composantes v_{x1} et v_{z1} à l'instant de la collision :

$$v_{x1} = v_{x0} \cos \omega_c \Delta t + v_{z0} \sin \omega_c \Delta t + \frac{E}{B} (1 - \cos \omega_c \Delta t) \quad (\text{IV.44})$$

$$v_{y1} = v_{y0} \quad (\text{IV.45})$$

$$v_{z1} = v_{x0} \sin \omega_c \Delta t + v_{z0} \cos \omega_c \Delta t + \frac{E}{B} \sin \omega_c \Delta t \quad (\text{IV.46})$$

Ensuite par intégration des composantes de v_1 entre t_0 et t_1 , on obtient les coordonnées x_1 , y_1 et z_1 de l'électron à l'instant de la collision t_1 (x_0 , y_0 et z_0 étant les coordonnées à l'instant initial t_0) :

$$x_1 = \frac{v_{x0}}{\omega_c} \sin \omega_c \Delta t + \frac{v_{z0}}{\omega_c} (1 - \cos \omega_c \Delta t) + \frac{E}{B} \Delta t - \frac{E}{B\omega_c} \sin \omega_c \Delta t + x_0 \quad (\text{IV.47})$$

$$y_1 = v_{y0} \Delta t + y_0 \quad (\text{IV.48})$$

$$z_1 = \frac{v_{x0}}{\omega_c} (\cos \omega_c \Delta t - 1) + \frac{v_{z0}}{\omega_c} \sin \omega_c \Delta t - \frac{E}{B\omega_c} (\cos \omega_c \Delta t - 1) + z_0 \quad (\text{IV.49})$$

On peut vérifier que si le champ électrique E est nul, on a :

$v_{x1}^2 + v_{y1}^2 + v_{z1}^2 = v_{x0}^2 + v_{y0}^2 + v_{z0}^2 = cste$ donc la force magnétique ne travaille pas.

En ce qui concerne la trajectoire de l'électron entre deux collisions successives, on peut remarquer que lorsque $E = 0$, la trajectoire naturellement circulaire dans le plan xOz est animée d'un mouvement uniforme le long de la direction de B c'est-à-dire le long de l'axe Oy . Le mouvement est un donc bien hélicoïdal. Lorsque le champ E n'est plus nul, le mouvement reste toujours hélicoïdal mais avec une direction de propagation différente de celle de l'axe Oy et un rayon dépendant du champ électrique et magnétique et du vecteur initial.

a) Cas d'un champ longitudinal ($B // E$)

Dans ce cas, le champ électrique est supposé antiparallèle à l'axe Oz ($-E // Oz$) et le champ magnétique est parallèle à l'axe Oz ($B // Oz$), les composantes de la force F de Lorentz dans le trièdre direct (x,y,z) s'écrivent :

$$F_x = m \frac{dv_x}{dt} = -eB v_y \quad (IV.50)$$

$$F_y = m \frac{dv_y}{dt} = eB v_x \quad (IV.51)$$

$$F_z = m \frac{dv_z}{dt} = eE \quad (IV.52)$$

Ou bien :

$$\begin{cases} \frac{dv_x}{dt} = -\omega_c v_y \\ \frac{dv_y}{dt} = \omega_c v_x \\ \frac{dv_z}{dt} = \frac{e}{m} E = a \end{cases} \quad (III.53)$$

a représente, l'accélération du champ électrique E .

Pour déterminer les composantes du vecteur vitesse à l'instant t_1 de la collision et les coordonnées de l'électron à cet instant, les équations (IV.53) sont résolues d'une façon analogue aux équations (IV.40) du paragraphe précédente. On obtient pour les composantes de v_1 :

$$v_{x1} = v_{x0} \cos \omega_c \Delta t - v_{y0} \sin \omega_c \Delta t \quad (IV.54)$$

$$v_{y1} = v_{x0} \sin \omega_c \Delta t + v_{y0} \cos \omega_c \Delta t \quad (IV.55)$$

$$v_{z1} = v_{z0} + a \Delta t \quad (IV.56)$$

Et pour les composantes de r_1 :

$$x_1 = x_0 + \frac{1}{\omega_c} [v_{y0}(\cos \omega_c \Delta t - 1) + v_{x0} \sin \omega_c \Delta t] \quad (\text{IV.57})$$

$$y_1 = y_0 + \frac{1}{\omega_c} [-v_{x0}(\cos \omega_c \Delta t - 1) + v_{y0} \sin \omega_c \Delta t] \quad (\text{IV.58})$$

$$z_1 = z_0 + v_{z0} \Delta t + \frac{1}{2} a \Delta t^2 \quad (\text{IV.59})$$

On remarque, contrairement au cas d'un champ magnétique transverse, que le module de la vitesse v_1 à l'instant t_1 de la collision n'est pas affecté par la présence d'un champ magnétique et que la composante longitudinale v_{z1} de v_1 n'est également pas influencée par la présence du champ magnétique longitudinal. Par contre les coordonnées de l'électron à l'instant t_1 sont influencées par la présence d'un champ magnétique longitudinal, ce qui aura pour conséquence comme on va le voir, une influence sur les coefficients de diffusion électroniques.

D'autre part, si $E = 0$ le module de la vitesse reste constant car la force magnétique ne travaille pas.

IV.5.6 Calcul des probabilités de collision

On connaît les composantes du vecteur vitesse et ses coordonnées juste avant la collision et on connaît également l'instant de la collision. Le problème maintenant est de connaître la nature de la collision et la vitesse de l'électron juste après la collision.

Pour cela on écrit, la fréquence totale de collision ν_{tot} incluant les collisions fictives en fonction des fréquences de collision des différents processus considérés [23] :

$$\nu_{tot} = \nu_{el}(\nu) + \nu_{ex}(\nu) + \nu_{ion}(\nu) + \nu_{at}(\nu) + \nu_{fic}(\nu) \quad (\text{IV.60})$$

tels que :

$\nu_{el}(\nu)$: fréquence de collision élastique. $\nu_{ex}(\nu)$: fréquence d'excitation.

$\nu_{ion}(\nu)$: fréquence d'ionisation. $\nu_{at}(\nu)$: fréquence d'attachement.

$\nu_{fic}(\nu)$: fréquence des collisions nulles.

Si on suppose que les collisions électron-molécule possible sont les collisions élastiques, l'excitation des molécules à partir du niveau fondamental, l'ionisation et l'attachement, les probabilités de collision correspondantes s'écrivent [23]:

$$p_{el}(\nu) = \frac{\nu_{el}(\nu)}{\nu_{tot}} p_{ex}(\nu) = \frac{\nu_{ex}(\nu)}{\nu_{tot}} p_{ion}(\nu) = \frac{\nu_{ion}(\nu)}{\nu_{tot}} p_{at} = \frac{\nu_{at}(\nu)}{\nu_{tot}}$$

Et $p_{fic}(\nu) = 1 - \sum p_{reel}(\nu)$

Pour déterminer la nature de la collision, il suffit de tirer un nombre aléatoire R_{col} et de le comparer aux différentes probabilités de collision.

R_{col} est un nombre aléatoire uniformément distribué entre 0 et 1. Donc la fraction de probabilité de chaque type de collision est donnée par :

$$p_i = \frac{v_i}{v_{tot}} \quad (IV.61)$$

$$\text{Avec : } \left\{ \begin{array}{l} 0 \leq R_{col} < \frac{v_1}{v_{tot}} \text{ collision de type 1} \\ \frac{v_1}{v_{tot}} \leq R_{col} < \frac{v_1+v_2}{v_{tot}} \text{ collision de type 2} \\ \dots \dots \dots \\ \frac{\sum_i^N v_i}{v_{tot}} \text{ collision nulle} \end{array} \right. \quad (IV.62)$$

IV.5.7 Traitement des collisions

Une fois que les équations du mouvement ont été résolues jusqu'au temps t_1 , nous devons décider de la nature de la collision pour la particule simulée. Cette collision peut être réelle ou fictive.

e) Collision élastique

Avant le choc, la vitesse de la particule projectile (électrons) est obtenue à partir de l'équation de la dynamique de mécanique classique tenant compte de l'accélération de la particule chargée par le champ électrique et magnétique.

Juste après le choc, dans le cas de collision nulle, la vitesse de la particule sera inchangée, la particule continue son mouvement dans la même trajectoire. En revanche, dans le cas d'une collision réelle, la vitesse de la particule après la collision dépend du type de collision effectuée. Pour déterminer cette vitesse, on commence par écrire l'équation de la quantité du mouvement dans le repère de laboratoire.

$$m_p v_p + m_c v_c = m_p v'_p + m_c v'_c \quad (IV.63)$$

m_p , v_p et m_c , v_c sont respectivement la masse et la vitesse de la particule projectile, la masse et la vitesse de la particule cible juste avant la collision. v'_p et v'_c : sont respectivement la vitesse de la particule projectile et la vitesse de la particule cible juste après la collision.

La vitesse de chaque particule après la collision, dans le cas où il y a conservation de l'énergie au cours de la collision (c'est-à-dire en présence d'un choc élastique) peuvent s'écrire comme suit :

$$\vec{v}'_p = \frac{m_p}{m_p+m_c} \vec{v}_p + \frac{m_c}{m_p+m_c} \vec{v}_c + \frac{m_c}{m_p+m_c} \vec{v}'_r \quad (\text{IV.64})$$

$$\vec{v}'_c = \frac{m_p}{m_p+m_c} \vec{v}_p + \frac{m_c}{m_p+m_c} \vec{v}_c - \frac{m_p}{m_p+m_c} \vec{v}'_r \quad (\text{IV.65})$$

\vec{v}'_r est l'énergie relative après la collision, avant la collision s'écrit $\vec{v}_r = \vec{v}_p - \vec{v}_c$

La figure (IV-1) montre une représentation schématique de la vitesse relative d'une particule chargée (électron) avant et après la collision dans le référentiel du laboratoire (x,y,z) et du centre de masse (x',y',z') .

θ_r et φ_r sont respectivement les angles polaire et azimutal du vecteur vitesse relative dans le repère de laboratoire. Les angles χ et ψ sont les angles polaire et azimutal dans le repère du centre de masse. La détermination de ces derniers angles se fait par simple tirage de deux nombre aléatoire (R_χ et R_ψ) distribués uniformément entre 0 et 1. Ces angles repèrent le vecteur vitesse relative v'_r dans le référentiel du centre de masse. Ils sont déduits des relations [22]:

$$R_\chi = \frac{\int_0^\chi \sin(\chi') d\chi'}{\int_0^\pi \sin(\chi') d\chi'} = \frac{1}{2} [1 - \cos(\chi')] \quad (\text{IV.66})$$

$$R_\psi = \frac{\int_0^\psi d\psi'}{\int_0^{2\pi} d\psi'} = \frac{\psi}{2\pi} \quad (\text{IV.67})$$

Ces expressions découlent du fait que nous avons assimilé la partie isotrope de la section efficace différentielle de collision à la collision élastique. On obtient finalement :

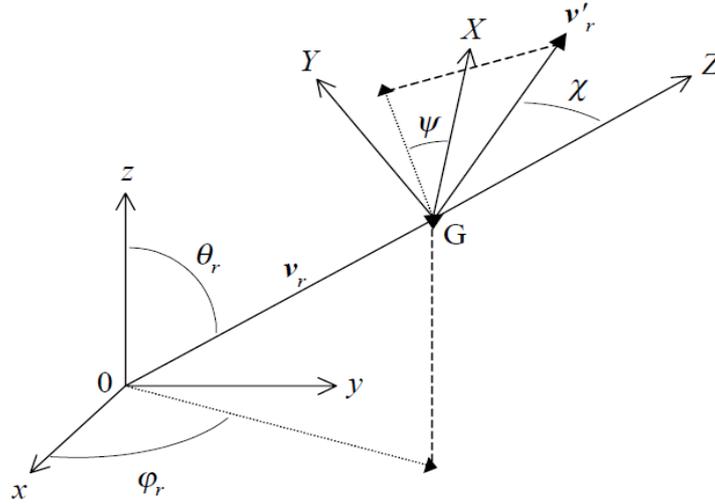
$$\chi = \arccos(1 - 2R_\chi) \quad (\text{IV.68})$$

$$\psi = 2\pi R_\psi \quad (\text{IV.69})$$

De plus, définissons θ_r et φ_r comme étant les angles polaire et azimutal repérant le vecteur vitesse relative v_r dans le référentiel du laboratoire :

$$\theta_r = \arccos\left(\frac{v_{zr}}{v_r}\right) \quad (\text{IV.70})$$

$$\varphi_r = \arccos\left(\frac{v_{xr}}{v_r \sin\theta}\right) \quad (\text{IV.71})$$



Figure(IV-1) : Représentation schématique de la vitesse relative avant et après la collision dans les référentiels du laboratoire et du centre de masse.

Sachant que, pour une collision élastique, le module de la vitesse relative se conserve, ses composantes cartésiennes après la collision s'écrivent [22]:

$$\begin{aligned} v'_{xr} &= v_r(\sin \chi \cos \psi \sin \varphi_r + \sin \chi \cos \psi \cos \theta_r \cos \varphi_r + \cos \chi \sin \theta_r \cos \varphi_r) \\ v'_{yr} &= v_r(-\sin \chi \cos \psi \cos \varphi_r + \sin \chi \sin \psi \cos \theta_r \sin \varphi_r + \cos \chi \sin \theta_r \sin \varphi_r) \end{aligned} \quad (IV.72)$$

$$v'_{zr} = v_r(-\sin \chi \sin \psi \sin \theta_r + \cos \chi \cos \theta_r)$$

Dans le cas où le neutre cible est supposé être au repos avant la collision, il est possible de relier la fraction d'énergie conservée par la particule incidente lors de la collision, à l'angle de déviation χ [21]:

$$\frac{\varepsilon'_p}{\varepsilon_p} = 1 + \frac{2m_p m_c}{(m_p + m_c)^2} (\cos \chi - 1) \quad (IV.73)$$

Si le projectile et la cible ont la même masse, ce rapport s'écrit :

$$\frac{\varepsilon'_p}{\varepsilon_p} = \frac{1}{2} (1 + \cos \chi) \quad (IV.74)$$

f) Collision inélastique conservatives (excitation)

Sous l'impact électronique la molécule est excitée. L'électron cède donc une partie de son énergie à la molécule. Cette énergie perdue correspond au seuil d'excitation ε_{pert} . L'énergie de l'électron juste après le choc se calcule à partir de la différence [21]:

$$\varepsilon'_p = \varepsilon_p - \varepsilon_{pert} \quad (IV.75)$$

$$\text{d'où } v'_p = \sqrt{\frac{2\varepsilon_2}{m}}$$

g) Collision inélastique non-conservatives (ionisation)

L'électron incident d'énergie ε_p ionise la molécule et lui cède une énergie égale au seuil d'ionisation ε_{ion} . L'énergie résiduelle $\varepsilon_p - \varepsilon_{ion}$ est supposée équirépartie entre l'électron diffusé (vitesse v'_p par exemple) et l'électron éjecté (vitesse v''_p). Ces deux électrons sont indiscernables.

Pour déterminer v'_p ou ε'_p et v''_p ou ε''_p , on suppose que la section efficace différentielle d'ionisation est constante (isotrope). Dans ce cas, les énergies ε'_p et ε''_p sont calculées à partir d'un tirage d'un nombre aléatoire R_{ion} , à partir de [21]:

$$\varepsilon_2 = R_{ion} \frac{\varepsilon_p - \varepsilon_{ion}}{2} \quad (\text{IV.76})$$

$$\text{Et} \quad \varepsilon''_p = \varepsilon_p - \varepsilon_{ion} - \varepsilon_2 \quad (\text{IV.77})$$

Les angles de déviation et l'azimut sont supposés isotropes. L'électron diffusé repart dans la direction (χ, φ) . Tandis que l'électron éjecté repart dans le même azimut que l'électron diffusé et un angle de déviation égale à $\chi + \frac{\pi}{2}$.

h) Collision entraînant l'attachement électronique

Dans ce cas, l'électron s'attache à la molécule et on passe à l'électron suivant.

IV.5.8 Calcul des paramètres de transport

Connaissant tous les paramètres de la collision, il ne reste plus qu'à échantillonner un certain nombre de grandeurs permettant de calculer les fonctions de distribution et les paramètres de transport.

Dans le cas de la simulation de Monte Carlo on utilise seulement les formules physiques des paramètres de transport (c'est-à-dire on utilise les lois de la mécanique classique). Les champs électrique et magnétique influencent particulièrement sur les composantes du vecteur vitesse (c'est-à-dire influence aussi sur l'énergie cinétique) et les composantes du vecteur position puisque la plupart des paramètres de transport sont calculés à l'aide de ces composantes. Pour la fonction de distribution on utilise la fonction de distribution d'énergie d'électron f_{en} mais dans ce cas elle dépend du temps et de l'énergie, donné par [33]: $f(t, \varepsilon) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon$.

Les différents paramètres de transport qui nous intéressent sont la vitesse de dérive, les coefficients de diffusion, les coefficients et les fréquences d'ionisation et d'attachement ainsi que l'énergie moyenne des électrons, Ils sont calculés à partir des relations suivantes :

a) Vitesse de dérive

La vitesse de dérive est donnée par [28]:

$$W = \frac{d\langle z \rangle}{dt} \quad (\text{IV.76})$$

On peut écrire $d\langle z \rangle$ comme suit :

$$d\langle z \rangle = \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} z_i \quad (\text{IV.77})$$

Où n_e est le nombre d'électrons parcouru les distances z_i .

La vitesse de dérive s'écrit alors :

$$W = \frac{1}{dt} \left(\frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} z_i \right) \quad (\text{IV.78})$$

On peut aussi écrire la vitesse de dérive dans une autre forme :

$$W = \langle v_z \rangle \quad (\text{IV.79})$$

Donc :

$$W = \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} v_{zi} \quad (\text{IV.80})$$

Où v_{zi} sont les vitesses des électrons suivant l'axe Oz .

b) Coefficient de diffusion transversal :

Le coefficient de diffusion transversal s'écrit sous la forme [28]:

$$D_T = \frac{d\langle x^2 \rangle}{2dt} = \frac{d\langle y^2 \rangle}{2dt} \quad (\text{IV.81})$$

Pour un résultat plus rigoureux, on va prendre le coefficient de diffusion transversal comme suit :

$$D_T = \frac{d\langle x^2 \rangle + d\langle y^2 \rangle}{4dt} \quad (\text{IV.82})$$

La moyen de x^2 et y^2 est donnée par :

$$d\langle x^2 \rangle = \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} x_i^2$$

$$d\langle y^2 \rangle = \frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} y_i^2$$

Donc, on peut écrire le coefficient de diffusion transversal comme suit :

$$D_T = \frac{1}{4dt} \left(\frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} (x_i^2 + y_i^2) \right) \quad (\text{IV.83})$$

c) Coefficient de diffusion longitudinal :

Le coefficient de diffusion longitudinal est défini par [28]:

$$D_L = \frac{d\langle z^{*2} \rangle}{2dt} \quad (\text{IV.84})$$

Avec $z^* = z - \langle z \rangle$

Donc:

$$D_L = \frac{d\langle z^2 - \langle z \rangle^2 \rangle}{2dt} \quad (\text{IV.85})$$

Avec:

$$\langle z \rangle^2 = \left(\frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} z_i \right)^2 \quad (\text{IV.86})$$

Donc, on trouve le coefficient de diffusion longitudinal sous la forme :

$$D_L = \frac{1}{2dt} \left(\frac{1}{n_e} \sum_{i=1}^{n_e} (z_i^2 - \langle z \rangle^2) \right)$$

d) Coefficient d'ionisation :

On a le coefficient d'ionisation qui est donné par [30]:

$$\alpha = \frac{\langle \nu_{ion} \rangle}{W} \quad (\text{IV.87})$$

Où $\langle \nu_{ion} \rangle$ est la fréquence moyenne d'ionisation et W est la vitesse de dérive donnée par l'équation (IV.68) ou (IV.70).

Pour le calcul de la fréquence d'ionisation moyenne on va utiliser la fonction de distribution des électrons donnée ci-dessus :

$$\langle \nu_{ion} \rangle = \int \nu_{ion} f(t, \varepsilon) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon \quad (\text{IV.88})$$

Donc :

$$\alpha = \frac{\int \nu_{ion} f(t, \varepsilon) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{W} \quad (\text{IV.89})$$

e) Coefficient d'attachement :

Le coefficient d'attachement est donné par [30] :

$$\eta = \frac{\langle \nu_{att} \rangle}{W} \quad (\text{IV.90})$$

Où $\langle \nu_{att} \rangle$ est la fréquence moyenne d'attachement.

De la même manière que la détermination du coefficient d'ionisation, on obtient le coefficient d'attachement:

$$\eta = \frac{\int \nu_{att} f(t, \varepsilon) \varepsilon^{1/2} d\varepsilon}{W} \quad (\text{IV.91})$$

f) Energie moyenne :

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{1}{N_i N_j} \sum_i \sum_j \varepsilon_{ij} \quad (\text{IV.92})$$

N_i représente le nombre total d'électrons et N_j le nombre total de collisions.

CHAPITRE V

Résultats et discussions

V.1 Introduction

Dans ce qui suit on va présenter les différents résultats obtenus par simulation de Monte Carlo. Nous avons calculé dans notre programme en Fortran, le temps de vol libre par tirage d'un nombre aléatoire (c'est le principe de la méthodes M-C) et après la position et la vitesse de chaque électron par les équations de mouvement que nous avons décrit précédemment dans les deux cas de champ magnétique, perpendiculaire et parallèle au champ électrique (transversal et longitudinal). On a traité aussi dans ce programme tous les processus de collision de type électron-molécule (élastique, inélastique, excitation, ionisation et attachement) par le calcul des fréquences et probabilités de collision et après la vitesse et l'énergie des électrons après chaque type de collision. Et en fin pour chaque électron et chaque type de collision on a stocké à un instant donné les composantes du vecteur vitesse et les coordonnées de l'électron qui nous a permis de déterminer les fonction de distribution et les paramètres de transport qui sont : la vitesse de dérive $v_z moy (W)$, le coefficient de diffusion transversal D_T , le coefficient de diffusion longitudinal D_L , le coefficient d'ionisation α , le coefficient d'attachement η et la fonction de distribution f_{ene} . Nous avons utilisé dans tous ces calculs les sections efficaces calculés par Yousfi [29].

V.2 Sections efficaces utilisées

Le calcul des paramètres de transport des électrons par la méthode de Monte Carlo nécessite la connaissance préalable des sections efficaces de collisions électron-molécule dans les différents gaz étudiés.

Les gaz étudiés sont la vapeur d'eau et l'azote en raison des données expérimentales déjà disponibles dans la littérature (paramètres de transport) concernant ces gaz en présence de champ électrique et magnétique.

Dans ce travail, on a utilisé les sections efficaces calculées par Yousfi [29] pour les deux gaz, elles sont présentées sur la figure (V-1) pour la vapeur d'eau et sur la figure (V-2) pour l'azote :

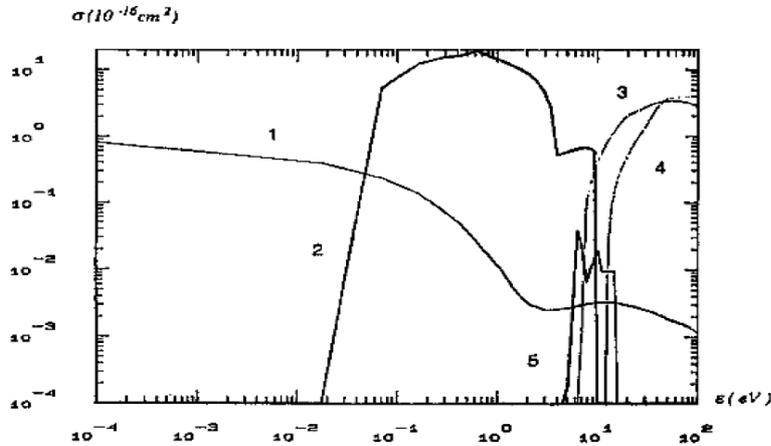


Figure (V-1) : Les sections efficaces de collision électron-molécule du vapeur d'eau.
 1. Section efficace de transfert de quantité de mouvement
 2. Section efficace total de rotation et de vibration
 3. Section efficace total d'excitation
 4. Section efficace total d'ionisation
 5. Section efficace total d'attachement

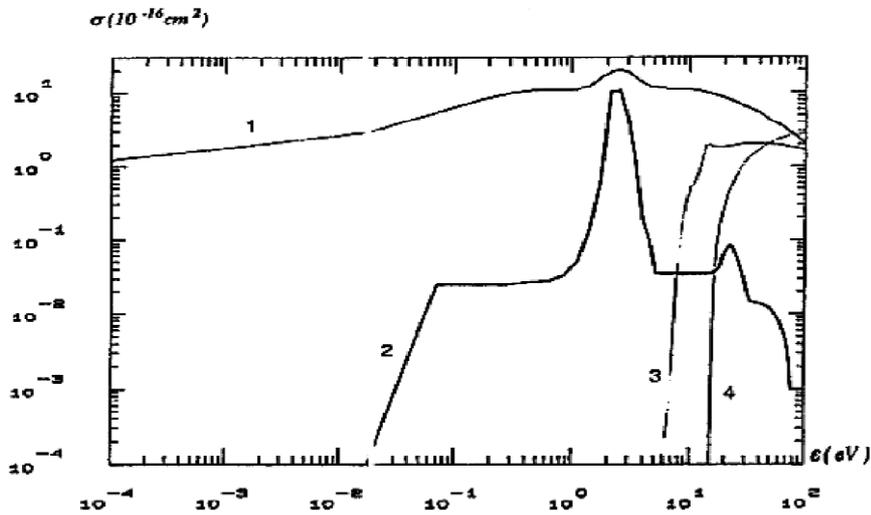


Figure (V-2) : Les sections efficaces de collision électron-molécule de l'azote
 1. Section efficace de transfert de quantité de mouvement
 2. Section efficace total de rotation et de vibration
 3. Section efficace total d'excitation
 4. Section efficace total d'ionisation

V.3 Résultats obtenus

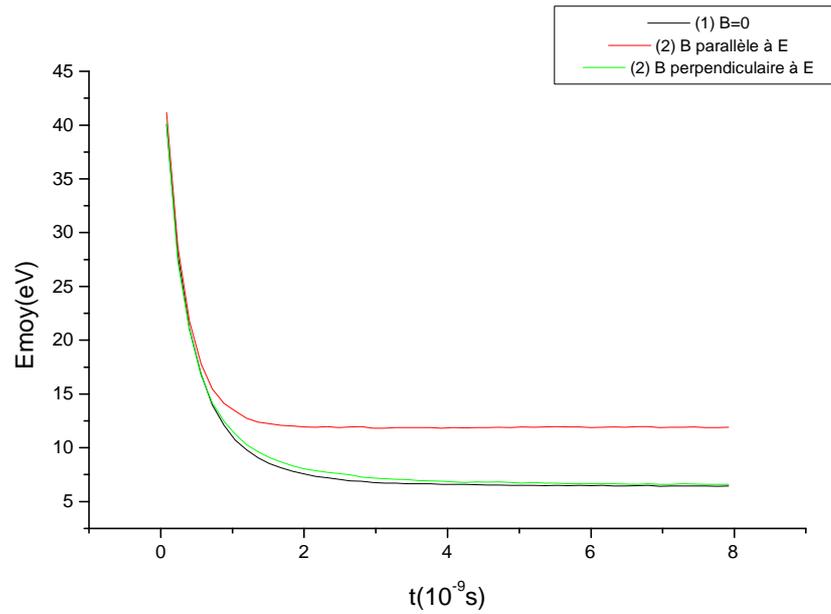
Les paramètres d'entrée qui doivent être choisis avant de commencer la simulation de Monte Carlo sont le temps maximum t_{max} , l'énergie maximum ε_{max} et le nombre d'électron primaire n_0 .

Le temps maximum a été choisi toujours plus grand que le temps de relaxation des paramètres de transport (voir figures (V-3) et (IV-4)). Les deux figures (relatifs à la vapeur d'eau et l'Azote) représentent la variation de l'énergie E_{moy} en fonction du temps, et ceci pour deux valeurs du champ électrique (donné en Townsend Td) et du champ magnétique (donné en Gauss/cm³). Les figures montrent que le temps de relaxation dépend des valeurs de champ électrique, il décroît lorsque le champ électrique augmente. Pour les intervalles de champ qui sont explorés dans ce qui suit t_{max} est supérieur à 5ns.

Le choix de l'énergie maximum dépend lui aussi des ordres de grandeur des champs électrique. L'énergie ε_{max} augmente lorsque le champ électrique croît et dépend aussi du gaz étudié. La précision de ce choix n'est pas du tout une nécessité absolue, en réalité il suffit de considérer une énergie assez grande pour traiter tous les situations qui vont suivre. On a choisi dans notre calcul $\varepsilon_{max}=100$ eV.

Afin de réduire les fluctuations statistiques et les écarts par rapport à la solution cherchée, le nombre d'électrons primaires n_0 a été choisi de telle manière que les paramètres de transport soient indépendants de ce nombre. On peut considérer que 10 000 électrons sont suffisants pour obtenir des paramètres de transport assez précis.

Il est important de rappeler qu'en présence uniquement d'un champ électrique, les électrons sont animés entre deux collisions d'un mouvement uniformément accéléré suivant la direction de champ. En général, l'ensemble des paramètres de transport (vitesse de dérive, énergie moyenne,...) croît avec le champ électrique comme on va le voir par la suite.



Figure(V.3) : Variation de l'énergie moyenne en fonction du temps dans la vapeur d'eau.

(1) : $E/N=190$ Td
 $B/N=0$ G/cm³

(2): $E/N=608$ Td
 $B/N=2119 \cdot 10^{-17}$ G/cm³

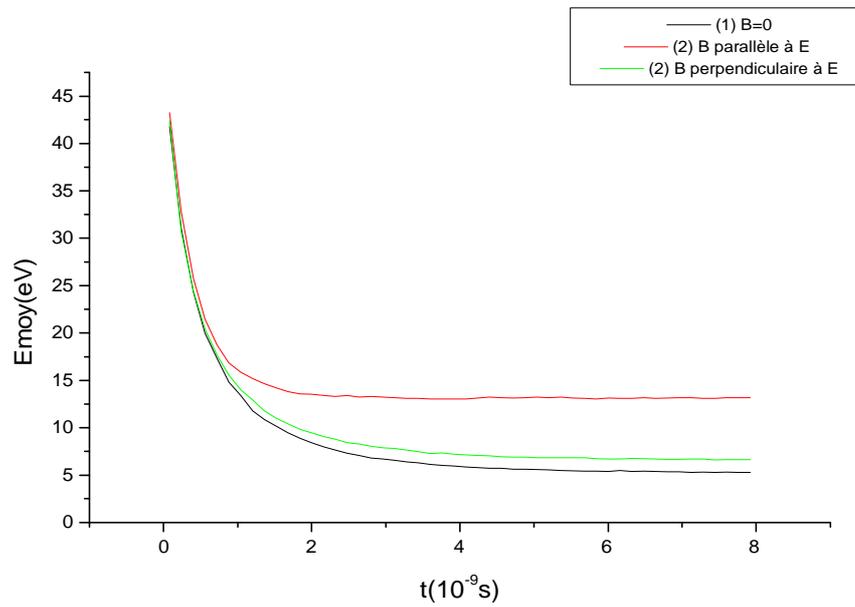


Figure (V.4) : Variation de l'énergie moyenne en fonction du temps dans l'azote.

(1): $E/N=190$ Td
 $B/N=0$ G/cm

(2): $E/N=608$ Td
 $B/N=2119 \cdot 10^{-17}$ G/cm³

Si en plus on applique un champ magnétique le mouvement des électrons change. Le champ magnétique imprime un mouvement circulaire à l'électron autour d'une direction qui dépend de celle du champ magnétique. L'électron subit également l'action du champ électrique qui en définitive lui impose une trajectoire hélicoïdale.

V.3.1 Vitesse de dérive

Nous avons calculer à partir du programme en Fortran, la vitesse de dérive $v_z moy$ en fonction du champ électrique réduit et les différentes variations sont reportés sur les figures (V-5), (V-6), (V-7) et (V-8). Ces courbes représentent la variation de la vitesse de dérive $v_z moy$ pour la vapeur d'eau et l'azote en fonction du champ électrique réduit E/N pour différentes valeurs du champ magnétique réduit (transversal et longitudinal) B/N .

On constate dans le cas de champ magnétique transversal que la vitesse de dérive croit avec E/N et décroît lorsque B/N augmente ceci est du à la force magnétique suivant Ox. La force magnétique admet deux composantes l'une suivant la direction de E qui s'oppose au mouvement des électrons le long de la direction du champ électrique. C'est cette composante qui a réduit la vitesse de dérive. L'autre composante de la force magnétique est normale à la direction du champ E , elle va écarter les électrons de leurs directions.

Lorsque le champ magnétique B est parallèle au champ électrique E , la force magnétique admet deux composantes qui sont perpendiculaires à la direction de E .

Dans le cas de champ électrique longitudinal, la vitesse de dérive croit avec le champ électrique qui accélère les électrons mais reste constante avec le champ magnétique donc il n'a aucun influence dans ce cas sur les électrons. Dans ce cas la vitesse de dérive des électrons suivant la direction de champ n'est pas influencée par la présence d'un champ magnétique longitudinal. Le module de la vitesse et par conséquent l'énergie moyenne des électrons ou la fréquence d'ionisation,...ne sont pas influencés par le champ magnétique longitudinal.

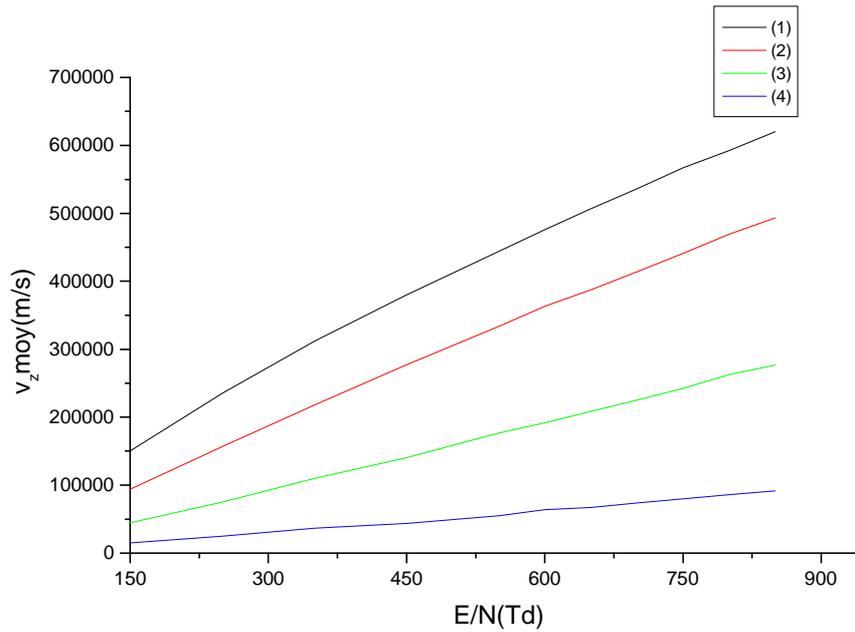


Figure (V-7) : Variation de la vitesse de d rive en fonction de E/N pour diff rentes valeur de B/N transversal dans l'azote.

- | | |
|--|---|
| (1): $B/N=0$ | (3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |
| (2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ | (4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |

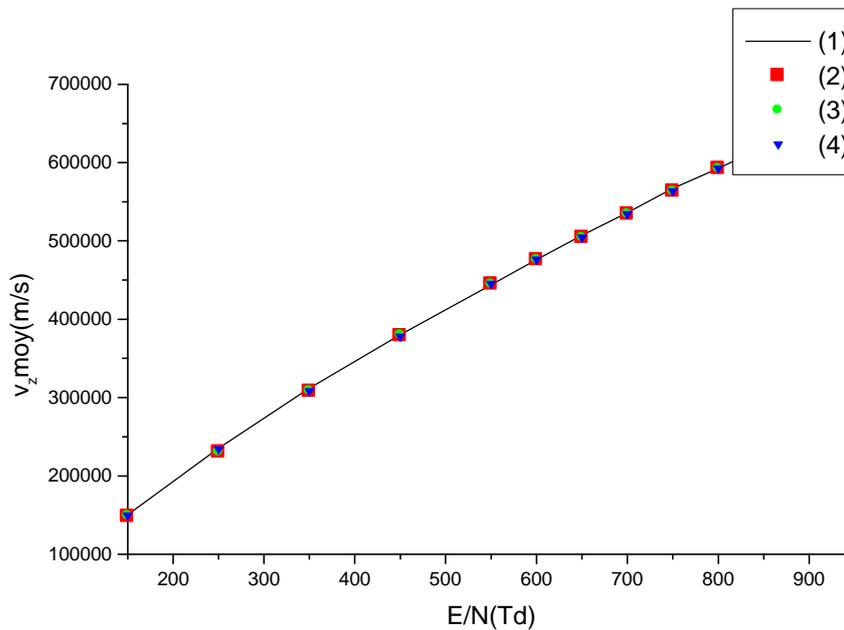


Figure (IV-8) : Variation de la vitesse de d rive en fonction de E/N pour diff rentes valeur de B/N longitudinal dans l'azote.

- | | |
|--|---|
| (1): $B/N=0$ | (3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |
| (2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ | (4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |

En conclusion, on peut dire que l'effet du champ magnétique transversal est de diminuer la vitesse et l'énergie moyenne des électrons (à cause de la force de Lorentz qui a une composante anti-parallèle à l'axe Oz) contrairement au champ électrique qui accélère les électrons.

V.3.2 Coefficient de diffusion transversal

Afin de montrer l'effet du champ magnétique transversal et longitudinal sur le coefficient de diffusion transversal, nous avons calculé ce dernier pour différentes valeurs du champ électrique et magnétique (perpendiculaire et parallèle au champ électrique) dans le cas de la vapeur d'eau et d'azote. Et nous avons représenté ce calcul sur les figures (V-9), (V-10), (V-11) et (V-12).

Contrairement à la vitesse de dérive et le coefficient d'ionisation et d'attachement comme on va les voir dans la suite, le champ magnétique transversal et longitudinal ont un effet sur le coefficient de diffusion transversal. La diminution de ce coefficient dans les deux cas du champ magnétique signifie que les électrons sont confinés autour de l'axe Oz.

On constate que la présence d'un champ magnétique transverse suivant Oy réduit sensiblement la diffusion dans le sens des axes Ox et Oz. Ces directions correspondent au sens des forces magnétiques qui d'une certaine manière réduit l'étalement des électrons suivant les axes des forces magnétiques.

Par contre le champ magnétique longitudinal a une influence sur les coefficients de diffusion le long des directions des forces magnétiques (axes Ox et Oy) c'est-à-dire le coefficient de diffusion transversal.

Donc un champ magnétique transversal réduit l'étalement transversal des électrons par rapport à la direction de E et les confine autour de l'axe Oz, direction de déplacement des électrons.

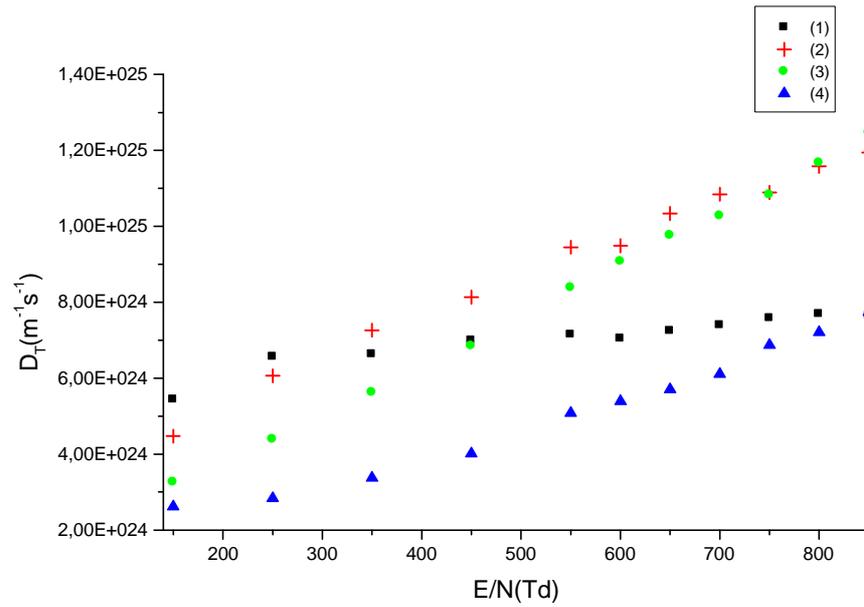


Figure (V-9) : Variation de D_T en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N transversal dans la vapeur d'eau.

- (1): $B/N=0$ (3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$
 (2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ (4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

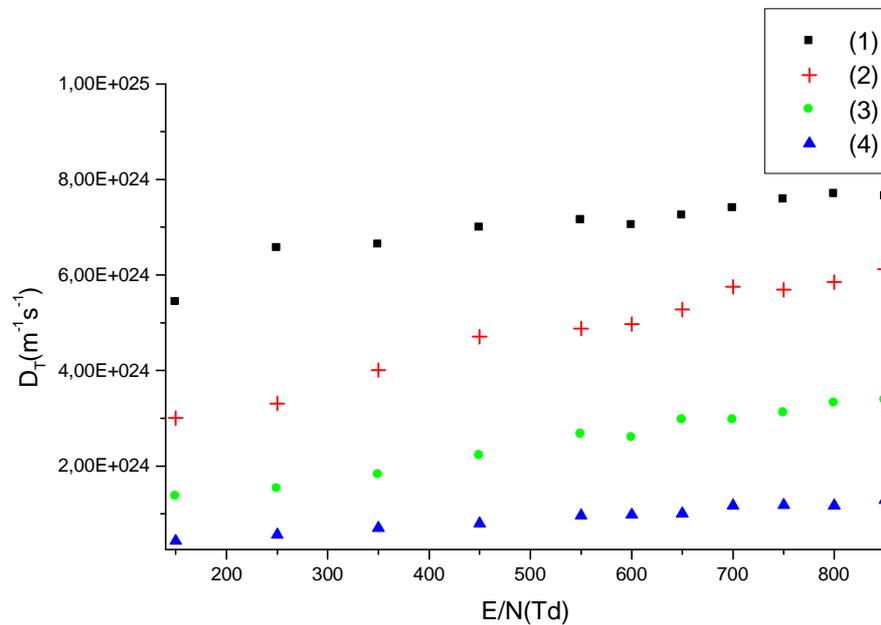


Figure (V-10) : Variation de D_T en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N longitudinal dans la vapeur d'eau.

- (1): $B/N=0$ (3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$
 (2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ (4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

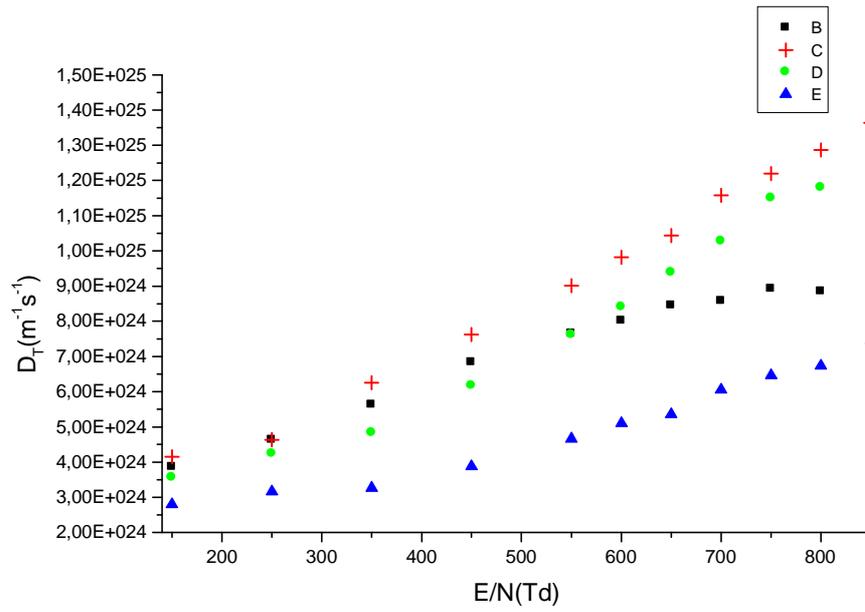


Figure (V-11) : Variation de D_T en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N transversal dans l'azote.

(1): $B/N=0$

(2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

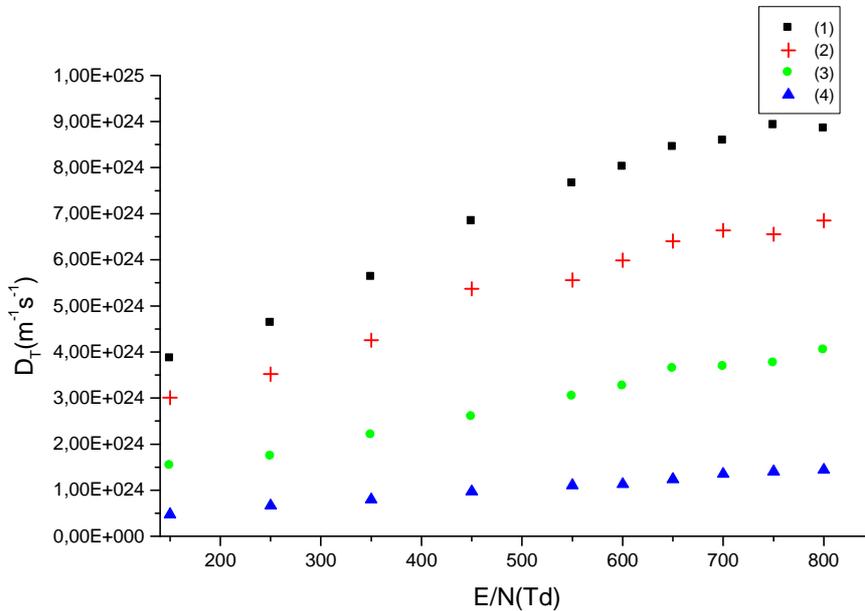


Figure (V-12) : Variation de D_T en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N longitudinal dans l'azote.

(1): $B/N=0$

(2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

V.3.3 Coefficient de diffusion longitudinal

Nous avons aussi calculé avec le même programme en Fortran, le coefficient de diffusion longitudinal en fonction du champ électrique réduit et pour différentes valeur de champ magnétique transversal et longitudinal. Les différentes variations sont reportées sur les figures (V-13), (V-14), (V-15) et (V-16).

On remarque que ce coefficient varie comme la vitesse de dérive donc il croit avec le champ électrique et décroît avec le champ magnétique transversal, on peut dire donc dans ce cas que les électrons sont confinés longitudinalement mais le champ magnétique longitudinal n'a pas d'influence sur ce coefficient.

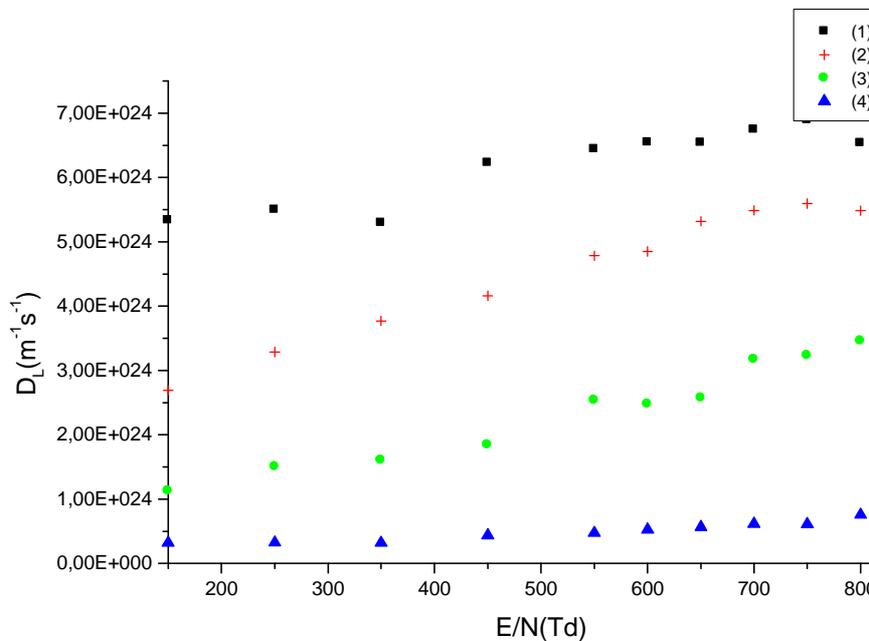


Figure (V-13) : Variation de D_L en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N transversal dans la vapeur d'eau.

(1): $B/N=0$

(2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

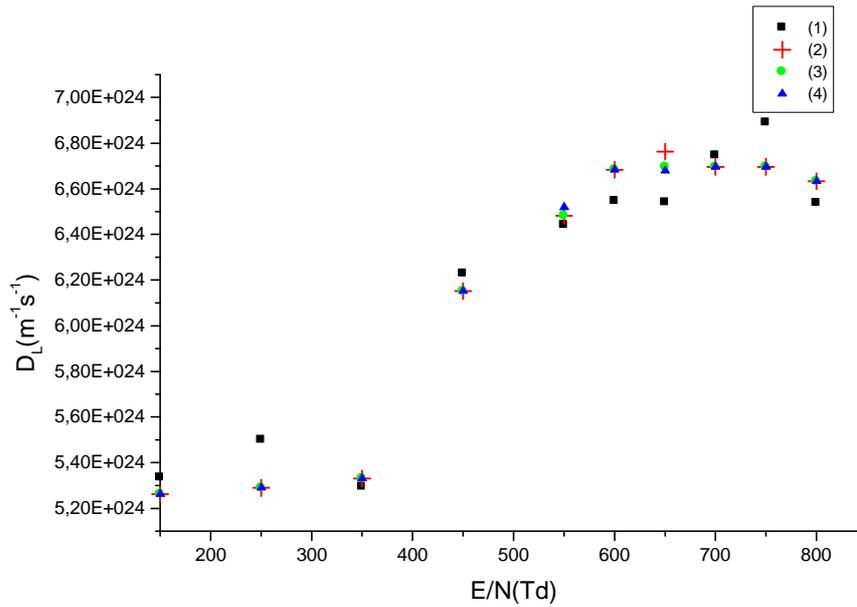


Figure (V-14) : Variation de D_L en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N longitudinal dans la vapeur d'eau.

(1): $B/N=0$

(2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

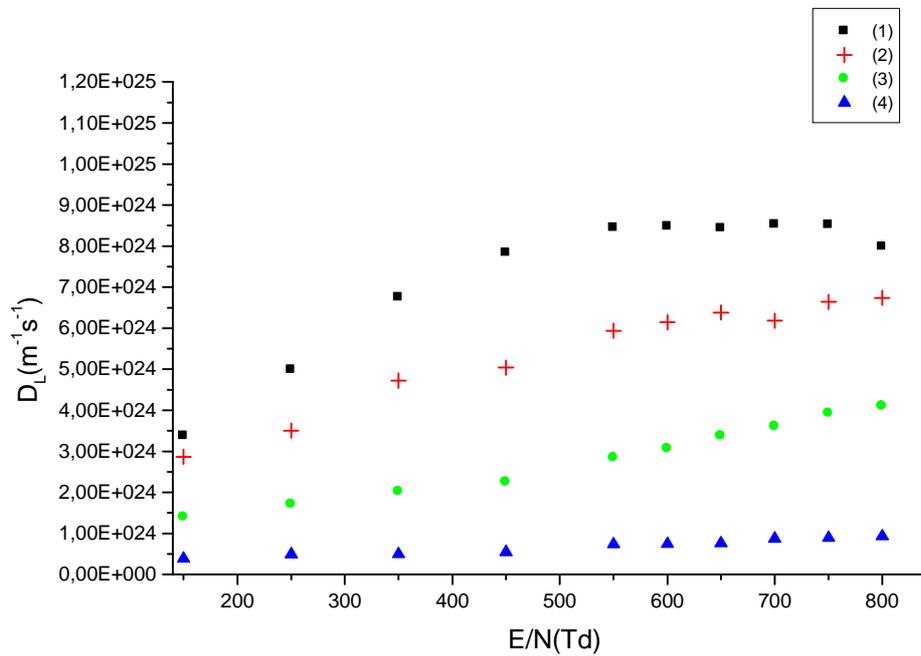


Figure (V-15) : Variation de D_L en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N transversal dans l'azote.

(1): $B/N=0$

(2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

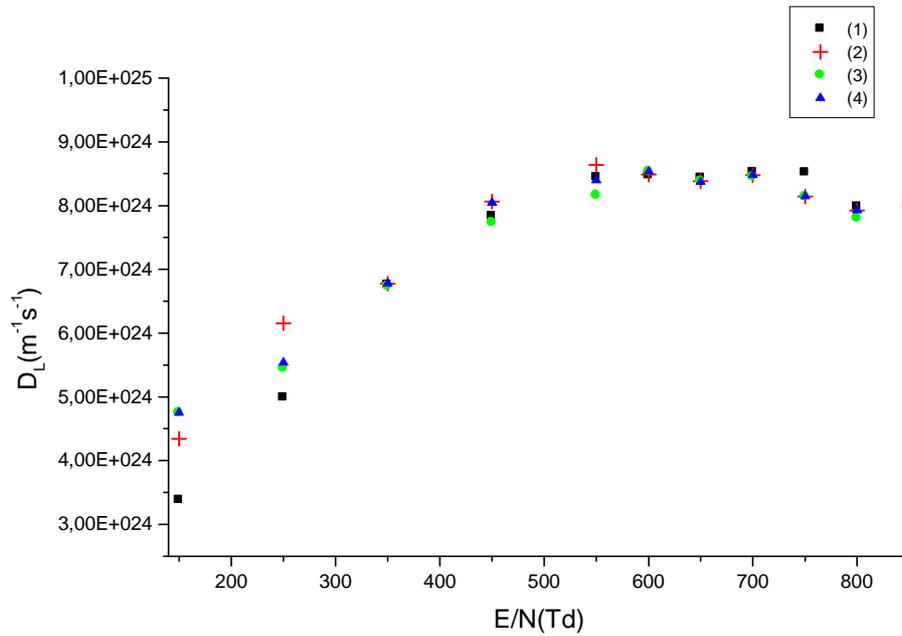


Figure (V-16) : Variation de D_L en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N longitudinal dans l'azote.

(1): $B/N=0$

(2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

V.3.4 Coefficient d'ionisation

Les figures (V-17), (V-18), (V-19) et (V-20) montrent comment varient les coefficients d'ionisation pour la vapeur d'eau et l'azote sous l'effet des champs électrique et magnétique (transversal et longitudinal).

On remarque dans le cas du champ magnétique transversal que le coefficient d'ionisation croît avec le champ électrique et décroît pour les champs magnétiques de faible intensité et après il se stabilise mais pour les champs magnétiques $3000 \cdot 10^{-17}$ et $3100 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ le coefficient d'ionisation diminue et après il deviendra constant (surtout dans le cas d'azote). Egalement, on remarque que le champ magnétique longitudinal n'a aucune influence sur le coefficient d'ionisation.

La vitesse de dérive et le coefficient d'ionisation diminuent dans le champ magnétique transversal. Ceci est dû à la déviation des électrons par la force magnétique suivant Ox , ce qui va réduire l'efficacité du champ électrique qui se comporte comme un champ électrique diminué qui vaut $E \cos \theta$. Ce qui rejoint le principe au champ électrique

équivalent autrement dit : les électrons dans un champ électrique et un champ magnétique transverse se comportent comme s'ils sont soumis à la seule action d'un champ électrique équivalent ($E \cos \theta$).

Le principe de champ électrique équivalent permet donc d'éviter le calcul ou la mesure des paramètres de transport en présence d'un champ transverse en se basant sur les résultats obtenus dans le cas d'un champ magnétique nul. L'application de ce principe nécessite la connaissance de l'angle de déflexion θ qui est donné par la relation approchée suivante :

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{\omega_c}{\nu}$$

Cette relation n'est pas valable lorsque $\operatorname{tg} \theta$ dépasse l'unité i.e.: lorsque B est fort. Dans notre cas lorsque $B/N = 3000 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ et $3100 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$.

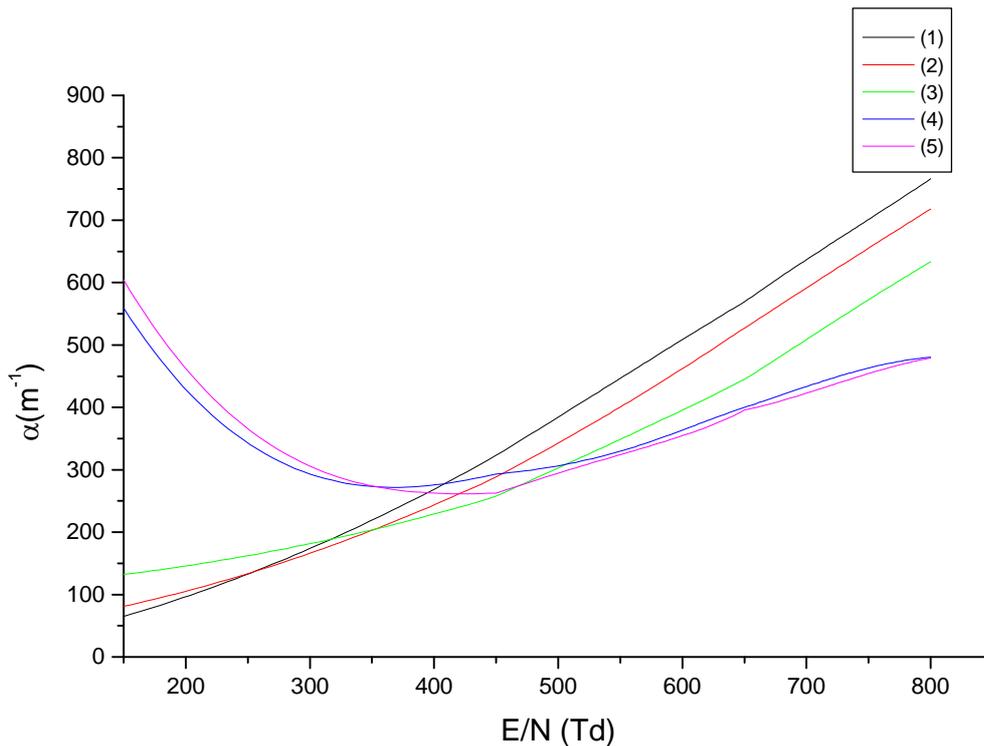


Figure (V-17) : Variation de α en fonction de E/N pour différentes valeurs de B/N transversal dans la vapeur d'eau.

- | | |
|---|---|
| (1): $B/N=0$ | (3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |
| (2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ | (4): $B/N=3000 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |
| (5): $B/N=3100 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ | |

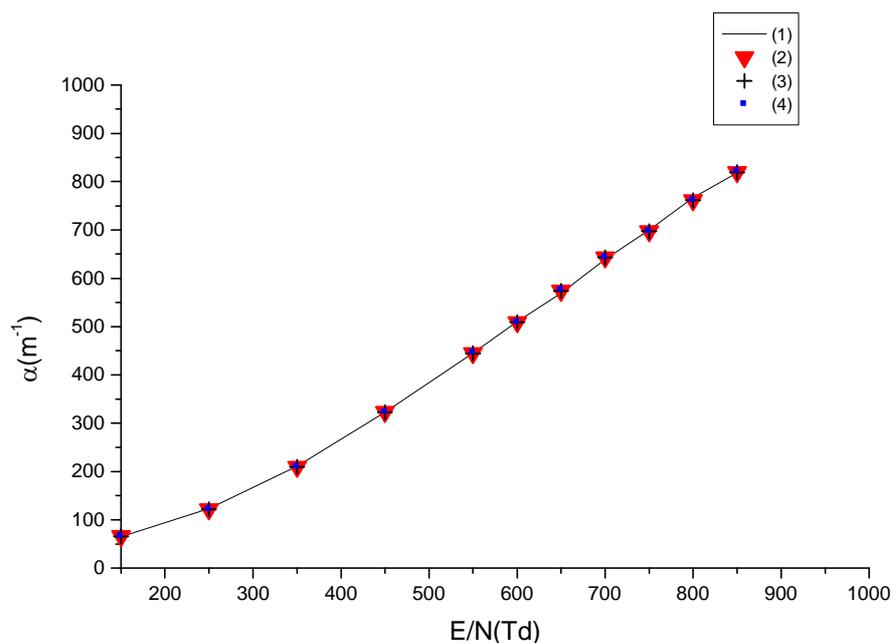


Figure (V-18) : Variation de α en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N longitudinal dans la vapeur d'eau.

- | | |
|--|---|
| (1): $B/N=0$ | (3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |
| (2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ | (4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |

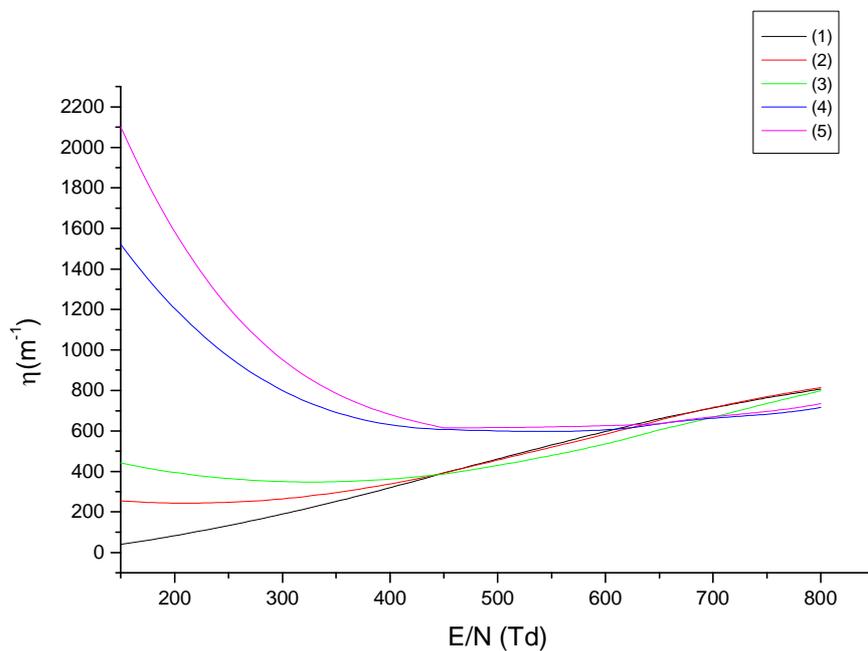


Figure (V-19) : Variation de α en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N transversal dans l'azote.

- | | |
|---|---|
| (1): $B/N=0$ | (3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |
| (2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ | (4): $B/N=3000 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |
| (3): $B/N=3100 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ | |

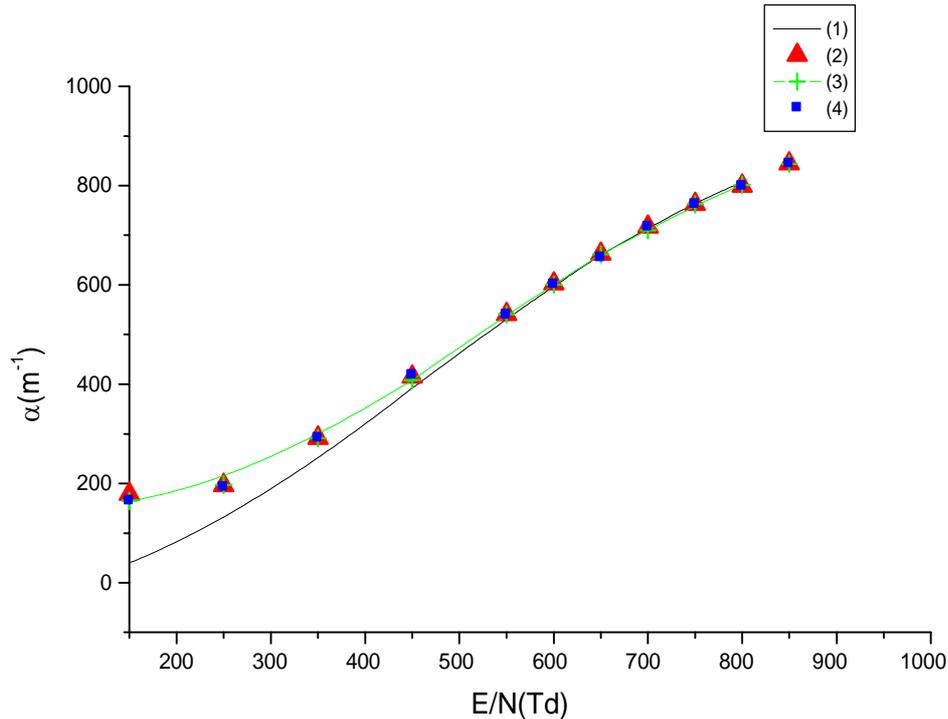


Figure (V-20) : Variation de α en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N longitudinal dans l'azote.

(1): $B/N=0$

(2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

V.3.5 Coefficient d'attachement

Nous avons calculé dans le programme le coefficient d'attachement η après le calcul de la fréquence d'attachement. On a tracé la variation de ce coefficient dans les figures (V-21) et (V-22) en fonction du champ électrique dans le cas d'un champ magnétique transversal et longitudinal dans la vapeur d'eau.

On remarque que le champ magnétique longitudinal n'a aussi aucune influence sur ce coefficient mais dans le cas du champ magnétique transversal le coefficient d'attachement diminue lorsque E/N et B/N augmentent.

La diminution de l'attachement est due à l'augmentation de la vitesse des électrons qui deviennent difficiles à attacher par les molécules (ou les atomes des gaz).

Nous remarquons aussi dans la figure (V-21) qu'il y a un fort attachement pour un champ magnétique transversal fort et un champ électrique faible.

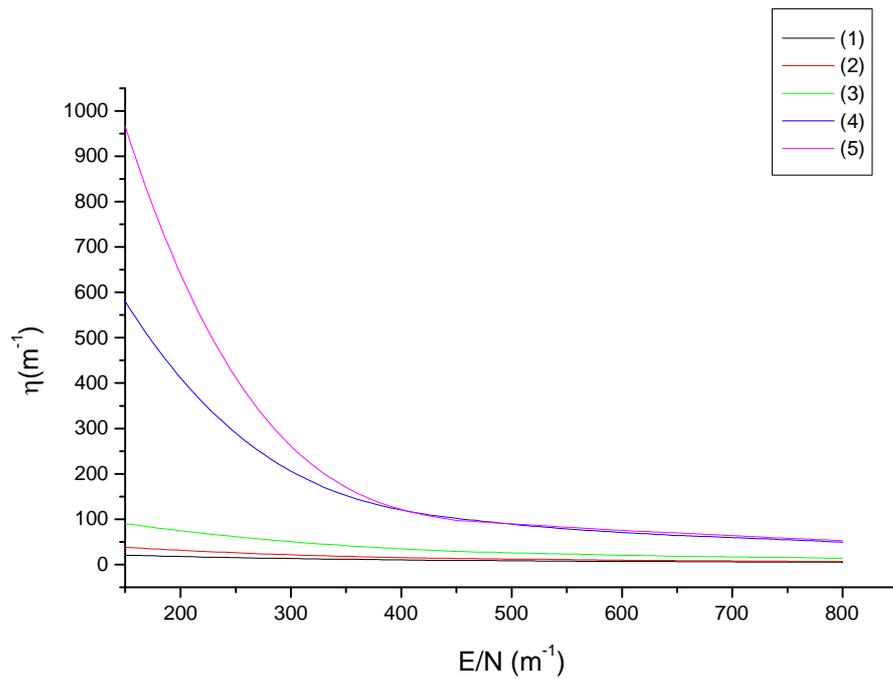


Figure (V-21) : Variation de η en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N transversal dans la vapeur d'eau.

- | | |
|---|---|
| (1): $B/N=0$ | (3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |
| (2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ | (4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |
| (5): $B/N=3100 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ | |

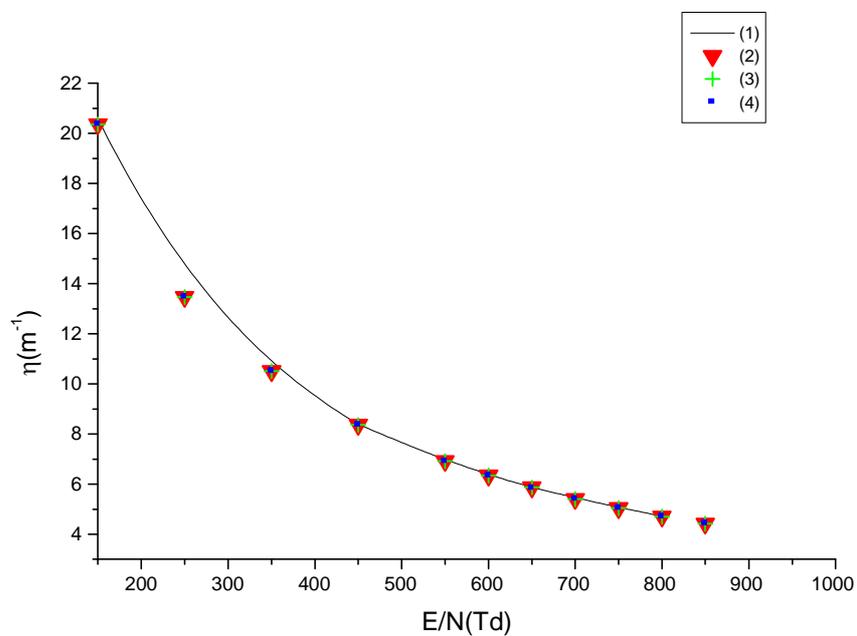


Figure (V-22) : Variation de η en fonction de E/N pour différentes valeur de B/N longitudinal dans la vapeur d'eau.

- | | |
|--|---|
| (1): $B/N=0$ | (3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |
| (2): $B/N=760 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ | (4): $B/N=3040 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ |

V.3.6 Fonction de distribution

Le calcul de la fonction de distribution solution de l'équation de Boltzmann par simulation Monte Carlo c'est notre but dans ce travail. On a calculé la fonction de distribution pour chaque électron se trouve au point $r(x, y, z)$ avec une vitesse v et à un instant t , les résultats que nous avons trouvés, sont reporté dans les figures (V-23), (V-24), (V-25), (V-26), (V-27) et (V-28).

On a tracé dans les deux figures (V-23) et (V-26) la variation de la fonction de distribution f_{ene} en fonction du temps pour différents valeurs de champ électrique avec $B/N = 0$ dans le cas de la vapeur d'eau et d'azote.

Et on tracé dans les figures (V-24), (V-25), (V-27) et (V-28) la variation de la fonction de distribution en fonction du temps pour différents valeurs de champ magnétique (transversal et longitudinal) avec $E/N=650$ Td dans le cas aussi de la vapeur d'eau et l'azote.

Comme tous les paramètres de transport la fonction de distribution n'est pas influencée par le champ magnétique longitudinal, elle est Maxwellienne soit pour la vapeur d'eau ou l'azote.

On remarque que lorsqu'on augmente le champ électrique la distribution des électrons diminue avec un écart d'elle jusqu'à une limite constante, c'est l'équilibre. L'allure de cette fonction n'est plus Maxwellienne dans le cas d'azote (figure (V-26)) pour les champs électrique $E/N=250, 350$ Td mais pour les deux valeurs de champ $E/N=550, 650$ Td elle n'est pas Maxwellienne dans le début mais après un certain temps elle deviendra Maxwellienne. Ce comportement corrobore avec celui de la fonction de distribution à l'équilibre.

Et pour le champ magnétique transversal la fonction de distribution augmente et atteint l'équilibre dans un temps court pour les valeurs de champ fort. On remarque aussi qu'il y a un écart de la fonction de distribution pour les faibles valeurs de champs magnétique parce que les électrons sont piégés dans le champ magnétique.

En conclusion la fonction de distribution des électrons est influencée par : la nature du gaz, le champ électrique et le champ magnétique.

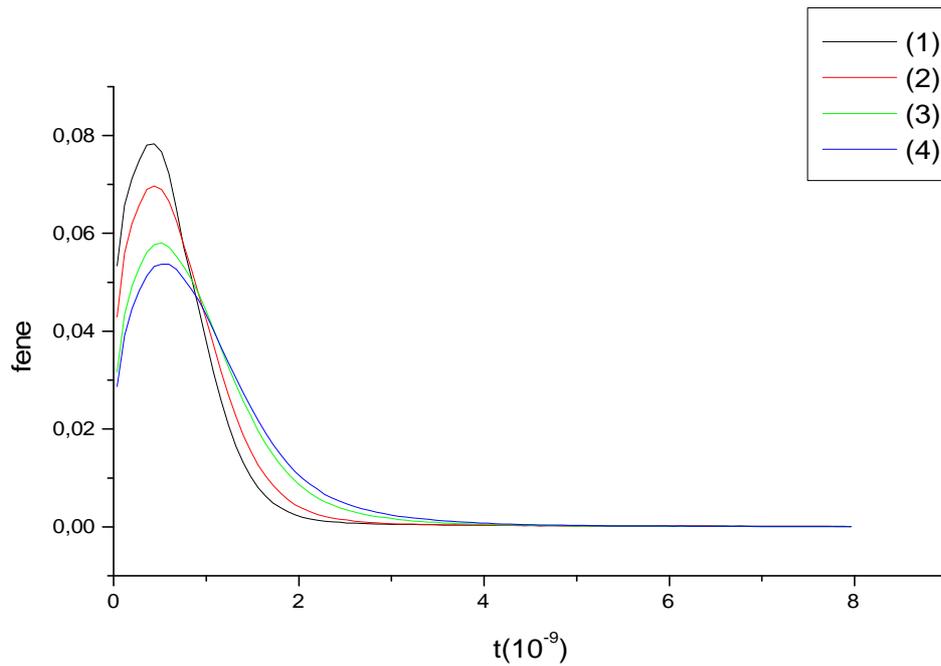


Figure (V-23) : Variation de la fonction de distribution f_{ene} en fonction de temps pour différentes valeur de E/N et pour $B = 0$ dans la vapeur d'eau.

(1): $E/N=250$ Td

(3): $E/N=550$ Td

(2): $E/N=350$ Td

(4): $E/N=650$ Td

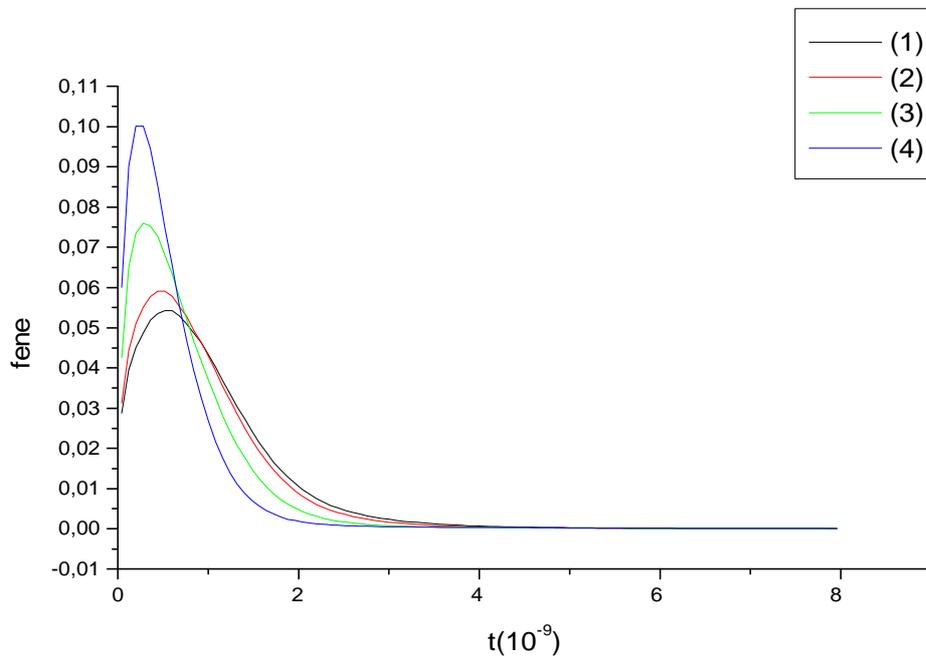


Figure (V-24) : Variation de la fonction de distribution f_{ene} en fonction de temps pour différentes valeur de B/N transversal et pour $E/N = 650$ dans la vapeur d'eau.

(1): $B/N=250 \cdot 10^{-17}$ G/cm³

(3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17}$ G/cm³

(2): $B/N=750 \cdot 10^{-17}$ G/cm³

(4): $B/N=3020 \cdot 10^{-17}$ G/cm³

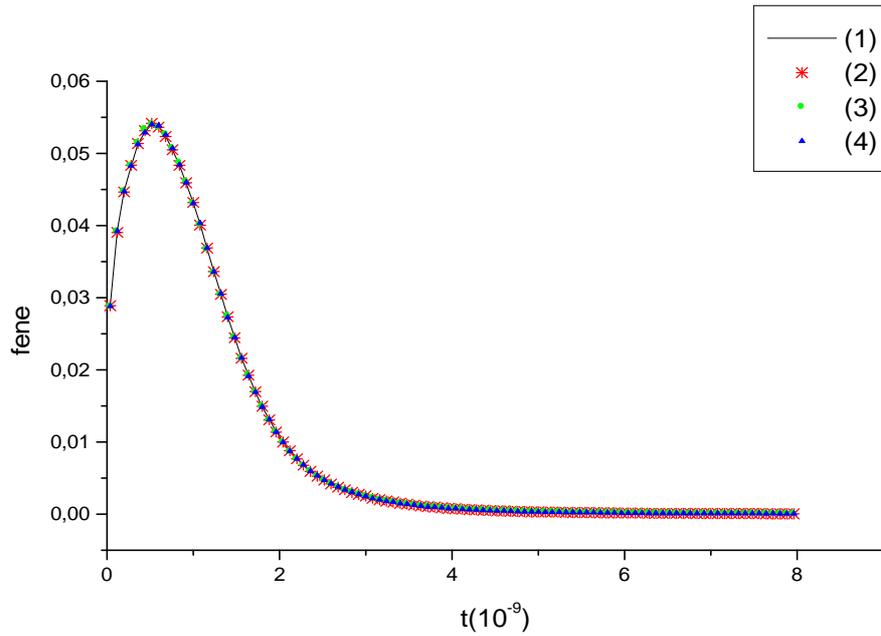


Figure (V-25) : Variation de la fonction de distribution f_{ene} en fonction de temps pour différentes valeur de B/N transversal et pour $E/N = 650$ dans la vapeur d'eau.
 (1): $B/N = 250 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ (3): $B/N = 1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$
 (2): $B/N = 750 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$ (4): $B/N = 3020 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

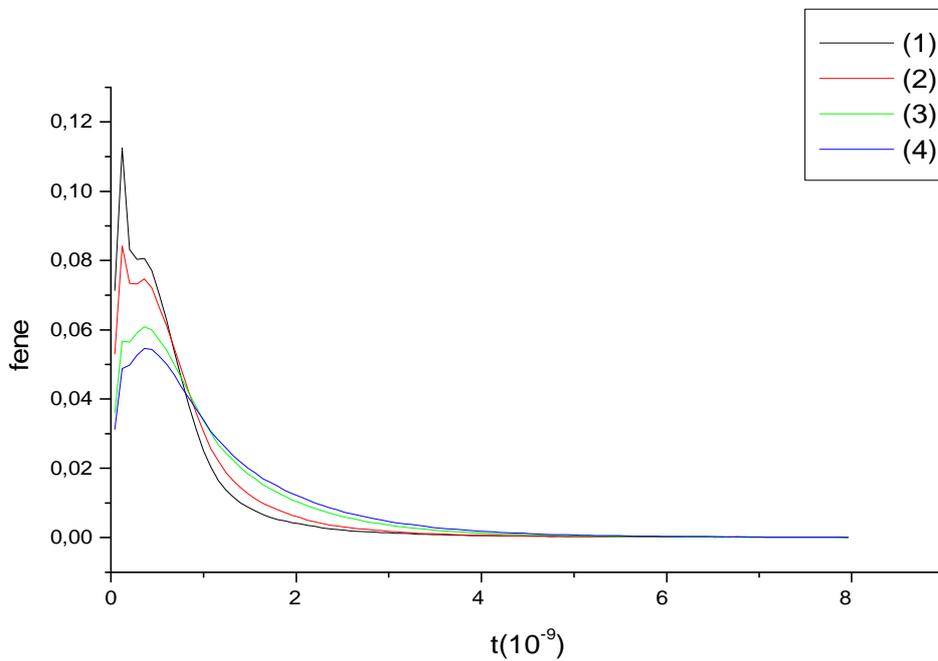


Figure (V-26) : Variation de la fonction de distribution f_{ene} en fonction de temps pour différentes valeur de E/N et pour $B/N = 0$ dans l'azote.
 (1): $E/N = 250 \text{ Td}$ (3): $E/N = 550 \text{ Td}$
 (2): $E/N = 350 \text{ Td}$ (4): $E/N = 650 \text{ Td}$

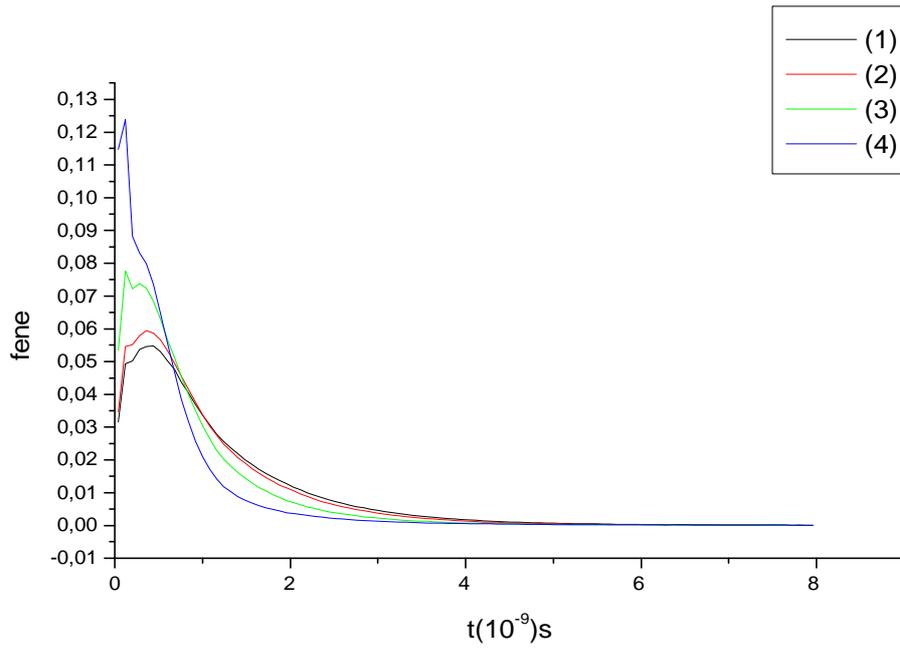


Figure (V-27) : Variation de la fonction de distribution *fene* en fonction de temps pour différentes valeur de B/N transversal et pour $E/N = 650$ dans l'azote.

(1): $B/N=250 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(2): $B/N=750 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(4): $B/N=3020 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

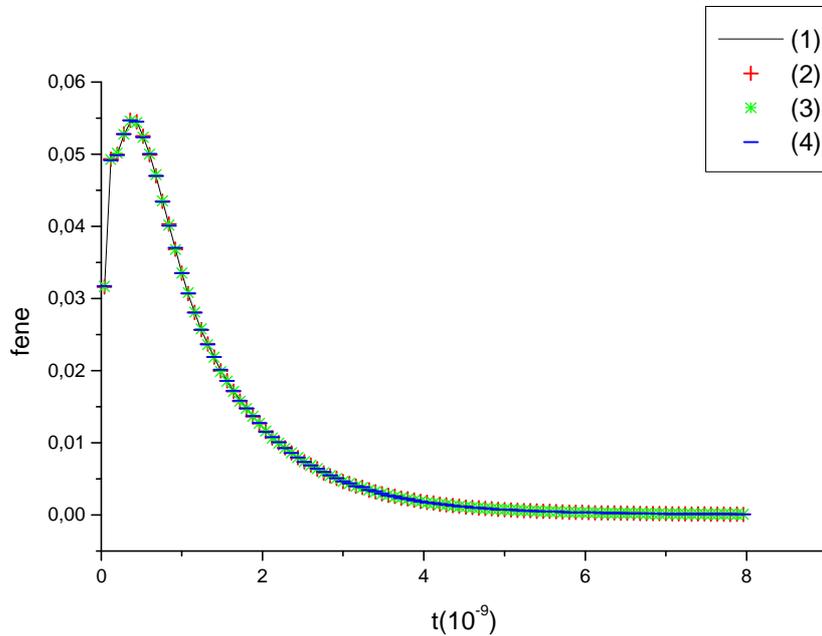


Figure (V-28) : Variation de la fonction de distribution *fene* en fonction de temps pour différentes valeur de B/N transversal et pour $E/N = 650$ dans l'azote.

(1): $B/N=250 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(2): $B/N=750 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(3): $B/N=1520 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

(4): $B/N=3020 \cdot 10^{-17} \text{ G/cm}^3$

Conclusion et perspectives

L'équation de Vlasov est l'équation cinétique que l'on obtient en partant du Hamiltonien d'un système de particules interagissant à travers des forces de longue portée et en faisant tendre leur nombre vers l'infini. Ceci justifie la nécessité de comprendre les propriétés de l'équation de Vlasov qui est fondamentale dans l'étude de systèmes à interaction à longue portée. D'autant plus que les systèmes à longue portée sont très courants dans la nature et dans de nombreux domaines de la physique, tels que la physique des plasmas, les systèmes astrophysiques et les interactions onde-particule dans les lasers...

Parmi toutes les questions qui peuvent exister ou être posées, nous avons focalisé au cours de cette thèse, la question de la relaxation d'une perturbation autour d'un état stationnaire homogène de l'équation de Vlasov en utilisant une approche à l'amortissement Landau.

Nous avons aussi traité dans cette thèse le couplage des équations de Maxwell non stationnaires avec l'équation de Vlasov, modélisant ainsi l'interaction non-collisionnelle de particules chargées dans un champ électromagnétique et obtenant un système simplifié dit de Vlasov-Poisson. Ce type d'interaction est présent dans de nombreux dispositifs pour lesquels la simulation numérique est un outil indispensable pour leur conception et optimisation. Deux méthodes numérique PIC et semi Lagrangienne ont été proposées pour résoudre de façon approchée le système de Vlasov-Poisson. Nous nous contentés dans ce travail à la description des différentes étapes de la méthode PIC et semi Lagrangienne pour faire la simulation. Dans ce travail, nous avons utilisé la Méthode MC, mais comme perspective, On intéressera à l'exploitation de la PIC.

Mon travail a consisté plus particulièrement à la résolution par la méthode numérique de Monte-Carlo, de l'équation de Boltzmann pour un gaz dilué dans lequel sont considérées uniquement les interactions décrivant les collisions entre les particules. Ont été calculés

aussi, les paramètres de transport des électrons soumis à l'action simultanée d'un champ électrique et d'un champ magnétique.

Dans un premier temps, nous avons décrit les principes de la méthode de Monte-Carlo ensuite nous avons posé les équations de mouvement des électrons dans le cas d'un champ magnétique transversal et longitudinal. Ensuite nous avons montré l'influence du champ électrique et magnétique sur les paramètres de transport et la fonction de distribution.

Dans le cas d'un champ magnétique transverse, nous avons constaté que la vitesse de dérive, les coefficients d'ionisation, d'attachement et de diffusion diminuent lorsque le champ magnétique augmente et le contraire pour la fonction de distribution.

Dans le cas d'un champ magnétique longitudinal, nous avons montré que pratiquement tous les paramètres de transport ne sont pas affectés par la variation du champ magnétique. Seul le coefficient de diffusion transverse diminue lorsque le champ magnétique augmente. Cela veut dire que les électrons sont confinés autour de l'axe Oz (direction du champ électrique) lors de leur déplacement dans le gaz.

Dans le futur, il me paraît souhaitable d'étendre un travail pour les ions pour des champs électrique et magnétique non uniformes.

Le problème qu'il faut voir aussi, dans l'équation de Boltzmann la présence de la force F provient d'un champ extérieur éventuel. On peut néanmoins, utiliser l'équation de Boltzmann dans des situations plus complexes où l'interaction entre les particules contient à la fois une partie à longue portée et une partie à courte portée. Il faut pour cela que les portées soient très différentes. Dans ce cas, la partie à longue portée contribue au premier membre de l'équation de Boltzmann (dans F) par l'intermédiaire du champ moyen créé par l'ensemble des particules. La partie à courte portée se retrouve dans le terme de collisions.

Références

- [1] Francis Filbert. Contribution à l'analyse et la simulation numérique de l'équation de Vlasov. Thèses de doctorat, Université Henri Poincaré, 2001.
- [2] Régine Barthelmé. Le problème de conservation de la charge dans le couplage des équations de Vlasov et de Maxwell. Institut de recherche mathématique avancée, Université Louis Pasteur et CNRS (UMR 7501), 2005.
- [3] Olivier Honenen. Parallélisation de méthodes adaptatives Semi-Lagrangienne pour la résolution de l'équation de Vlasov. Thèses de doctorat, Université Louis Pasteur.
- [4] Stéphanie Salmon. Contribution aux méthodes numériques pour la simulation d'écoulements de fluides, d'électromagnétisme et de physique des plasmas. Thèses de doctorat, Université de Strasbourg.
- [5] J-L. Delcroix et A. Bers, Physique des plasmas, CNRS Editions, tome 2 (1994). P1.
- [6] N. Potier, Physique statistique hors d'équilibre. Processus irréversibles linéaires, CNRS Editions, (2007). P 95.
- [7] S. Vaclair, Elément de physique statistique hasard, organisation, évolution, InterEditions.
- [8] M. Moison et J. Pelletier, physique des plasmas collisionnels, application aux décharges haute fréquence, EDP Sciences (2006).
- [9] C. Ngo et H. Ngo, Physique statistique, Introduction, cours et exercices corrigés.
- [10] Pottier N, Physique statistique hors d'équilibre : Equation de Boltzmann, réponse linéaire.
- [11] J-M Rax, Physique des plasmas cours et application (2005).
- [12] Alexandre Mouton. Approximation multi-échelles de l'équation de Vlasov, thèse de Magistère.
- [13] Siham LAYOUNI. Etude d'une méthode de volumes finis pour la résolution des équations de Maxwell en deux dimensions d'espace sur des maillages quelconques et couplage avec l'équation de Vlasov, Thèses de doctorat, Université Toulouse, 2008.
- [14] S. Cordier, T. Goudon, M. Gutnic, E. Sonnendrücker, Numerical Methods for Hyperbolic and Kinetic Problems, CNRS Editors, 2003.
- [15] B. Terzic , D. Mihalcea, C. L. Bohn , Wavelet-Based Poisson Solver for use in Particle-In-Cell Simulation, Lawrence Berkeley National Laboratory, Berkeley, USA.

- [16] B. Lapeyre, E. Pardoux, R. Sentis, Méthodes de Monte-Carlo pour les équations de transport et de diffusion, Springer.
- [17] J.M. Hamersley, D.C Handscomb, les methods de Monte-Carlo, Dunod, Paris, 1967.
- [18] F. Jedrzejewski, Modèles aléatoires et physique probabiliste, Springer-Verlag, France 2009.
- [19] George S. Fishman, Monte Carlo Concepts, Algorithms, and Applications, Springer-Verlag New York, 1996.
- [20] L. Laurencelle, Hasard nombres aléatoires et Méthode Monte Carlo, université du Québec, 2001.
- [21] Djilali BENYOUCEF, Modélisation particulière et multidimensionnelle des décharges hors équilibre à basse pression excitées par champs électromagnétiques, thèse de Doctorat, Université Toulouse, 2011.
- [22] Ivan REVEL, Simulation Monte Carlo des particules lourdes dans les décharges luminescentes, thèse de Doctorat, Université Toulouse, 1999.
- [23] M. Yousfi, A. Himoudi and A. Gaouar, Boltzmann equation and Monte Carlo analysis of electron-electron interactions on electron distributions in non thermal cold plasma, Centre de Physique Atomique, Laboratoire des décharges dans les gaz, Université Paul Sabatier, 1992.
- [24] N. J. Carron, Energy-diffusion calculation of the electron-swarm distribution function, Mission Research Corporation, P.O. Drawer 719, Santa Barbara, California 93102, 1991.
- [25] J.A. Kunc and W. H. Soon, Electron Boltzmann equation in nonthermal plasmas, Departments of Aerospace Engineering and physics, university of Southern California, Los Angeles, California 90089-1191, 1990.
- [26] J. P. Boruf, Characteristics of a dusty nonthermal plasma from a particle-in-cell Monte Carlo simulation, Centre de Physique Atomique de Toulouse, Université Paul Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse CEDEX, France, 1992.
- [27] B. Liani, B. Ardjani, Study of the Magnetic Field Effect on the Electrons' Thermal Equilibrium, Chines Journal of Physics, 2010.
- [28] Yousfi Mohamed, Thèse de doctorat d'état, n° 1244 Université Paul Sabatier, Toulouse (1986).
- [29] M. Yousfi, N.Azzi et I.Gallimberti, S.Stangherlin Collection de données de base numéro 1, Toulouse-padova, 1988.

[30] Théodore VASSILIADIS Thèse de doctorat du 3^e cycle, n° 3139 Université Paul Sabatier, Toulouse, 1985.

[31] E. Sonnendrucker, Approximation numérique des équations de Vlasov-Maxwell, Notes du cours de M2, Université de Strasbourg, 2010.

[32] C. Gasquet, P. Wintomski, Analyse de Fourier et applications, Dunod, université Joseph Fourier, 1991.

[33] A. Benamar, Application de la Méthode de Monté Carlo dans le Calcul des Coefficients de Transport d'un Gaz Faiblement Ionisé, thèse de Magistère, 2006.

Résumé

Cette thèse est consacrée à l'étude des solutions analytique et numérique de l'équation de Vlasov, ainsi que, la solution numérique de l'équation de Boltzmann.

La méthode analytique utilisée est basée sur la transformée de Fourier-Laplace. C'est une méthode mathématique classique pour résoudre les équations différentielles après les avoir rendu algébriques, alors une approche de la fonction de distribution est donnée en utilisant le modèle de Vlasov-Poisson linéarisé. Nous avons aussi présenté les principales méthodes utilisées pour la résolution numériques de l'équation de Vlasov, de type Particle In Cell (PIC) et semi-Lagrangiens.

Dans ce présent travail, nous avons aussi étudié les différentes étapes de la méthode de Monte Carlo permettant le calcul des paramètres de transport des électrons et des fonctions de distribution qui sont solutions de l'équation de Boltzmann, et ceci en présence de champ électrique et magnétique uniformes (nul, parallèle et perpendiculaire) dans un gaz faiblement ionisé.

La méthode de Monte Carlo, est bien adaptée lorsque le système est décrit par des comportements aléatoires. Les calculs ont été réalisés pour deux gaz différents : la vapeur d'eau et l'azote (à cause de leurs utilisations dans plusieurs applications technologiques). Les paramètres calculés sont: la vitesse de dérive, les coefficients d'ionisation et d'attachement, les coefficients de diffusion et la fonction de distribution.

Mots clés : plasma, équation de Vlasov, la méthode PIC, la méthode semi Lagrangienne équation de Boltzmann, fonction de distribution, décharge électrique, gaz faiblement ionisé et la méthode Monte Carlo.

Abstract

This thesis is devoted to the study of the analytical and numerical solutions of Vlasov equation, and to the numerical solution of Boltzmann equation.

The analytical method used is "the transform of Fourier-Laplace" it is a traditional mathematical method to solve differential equations after makes them algebraic so, an approach of the distribution function is given by using the linearized model Vlasov-Poisson. After we presented the principal methods used for the numerical resolution of Vlasov equation, Particle In cell (PIC) and semi-Lagrangian.

In this work, we also studied the different stages of the Monte Carlo method for calculating the transport parameters of electrons and distribution functions solution of the Boltzmann equation in the presence of the uniform electric and magnetic field (null, parallel and normal) in a weakly ionized gas.

The Monte Carlo method takes into account several random phenomena. This calculation was performed for two different gases: water vapor and nitrogen (because of their uses in several technological applications). The calculated parameters are: the drift velocity, the coefficients of ionization and attachment; coefficients of diffusion and distribution function.

Keywords: plasma, Vlasov equation, PIC method, semi-Lagrangian method, Boltzmann equation, distribution function, electric discharge, weakly ionized gas and Monte Carlo method.

ملخص

هذا البحث خصص لدراسة الحلول التحليلية والعديدية لمعادلة Vlasov، والحل العددي لمعادلة Boltzmann. الطريقة التحليلية المستخدمة تستند على تحويل Fourier-Laplace. وهي طريقة رياضية كلاسيكية لحل المعادلات التفاضلية بعد إرجاعها جبرية. إذن قمنا بإعطاء دالة توزيعية تقريبية باستخدام النموذج الخطي Vlasov-Poisson. وقدمنا أيضا الطرق الرئيسية المستعملة لحل معادلة Vlasov عدديا والتي هي PIC و Semi-Lagrangienne.

درسنا أيضا في هذا العمل، المراحل المختلفة للطريقة Monte Carlo لحساب متغيرات النقل ودالة التوزيع والتي هي حل للمعادلة Boltzmann، وهذا في وجود حقل كهربائي و مغناطيسي (منعدم، موازي ومعامد للحقل الكهربائي) في غاز ضعيف التأين. طريقة Monte Carlo هي مناسبة تماما عندما يوصف النظام من خلال السلوكيات العشوائية. الحسابات التي قمنا بها هي من أجل الغازين المختلفين: بخار الماء و نيتروجين (بسبب استخدامها في العديد من التطبيقات التكنولوجية). المتغيرات المحسوبة هي: سرعة الانحراف، معاملات التأين والربط، معاملات الانتشار ودالة التوزيع.

كلمات البحث: بلازما، معادلة Vlasov، طريقة PIC، طريقة Monte Carlo، معادلة Boltzmann، غاز ضعيف التأين، طريقة Monte Carlo.