

RESOLUTION NUMERIQUE EN 2D DES EQUATIONS DE TRANSPORT PAR ADBQUIKEST

N. Benaïred

Institut des Sciences et technologies Centre universitaire de Relizane.

Email : nbenaïred@yahoo.fr

Abstract: We present in this article a two dimensional resolution of the transport equation using the numerical scheme ADBQUIKEST. The obtained results are compared to those found in the literature

Résumé : Nous présentons dans cet article la résolution bidimensionnelle de l'équation de transport en utilisant le schéma numérique ADBQUIKEST. Les résultats obtenus sont comparés à ceux trouvés dans la littérature.

Keywords – ADBQUIKEST, équation Dérive-Diffusion, Modelisation

1. Nomenclature

Les indexes e et p sont utilisés respectivement pour les électrons et les ions positifs.

n	Densité des particules chargées
Φ	Flux des particules chargées
S	Terme source
V	Potentiel électrique
E	Champ électrique
μ	Mobilité des particules chargées
D	Coefficient de diffusion
α	Coefficient d'ionisation
W	Vitesse de dérive
P	Pression
N	Densité du gaz
e	Charge élémentaire
ϵ_0	Permittivité
Δx	Pas spatial longitudinal
Δy	Pas spatial transversal
Δz	Pas spatial tangential
Δt	Pas temporel
c	Nombre de courant CFL (Friedrich-Levy)

2. Introduction

La simulation numérique de la dynamique des particules transportées dans une décharge électrique repose sur le choix des algorithmes pour résoudre les équations du modèle numérique de cette décharge.

Beaucoup de chercheurs se sont intéressés à la modélisation pour résoudre les équations de continuité, La modélisation numérique en 2D exige l'utilisation d'un schéma numérique puissant qui pourra, d'une part, suivre les forts gradients de densité et d'autre part, il est souhaitable que ce schéma soit souple et consomme peu de temps de calcul pour une exploitation simple et facile. Donc, les algorithmes utilisés doivent répondre aux contraintes du phénomène physique et aux exigences du temps de calcul. Notre travail est consacré à la mise au point d'un modèle numérique tridimensionnel performant pour résoudre les équations de transport.

3. Modèle numérique

L'équation mono-dimensionnelle de type Dérive-Diffusion nécessaire à la résolution des équations de transport a été définie par Dhali et Williams pour chaque espèce chargée comme suit:

$$\frac{\partial n_e(\bar{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \Phi_e(\bar{r}, t)}{\partial \bar{r}} = S_e(\bar{r}, t) \quad (1)$$

$$\frac{\partial n_p(\bar{r}, t)}{\partial t} + \frac{\partial \Phi_p(\bar{r}, t)}{\partial \bar{r}} = S_p(\bar{r}, t) \quad (2)$$

avec S le terme source donné par l'équation suivante

$$S = n\mu\alpha E$$

4. Méthode numérique

Le schéma QUICKEST (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms) est une technique décrite et développée par Leonard [Le-1] qui n'exige pas une connaissance spéciale de la solution, et qui permet de traiter tous les points de l'intervalle inter-électrodes dans le calcul.

L'utilisation des flux dans le schéma Quickest peut générer l'apparition de nouveaux maximums de densités et réintroduire ainsi des densités négatives. Ceci est le rôle du Flux Limiteur tel que la technique ADBQUICKEST qui est la plus récente parmi les techniques décrites dans la littérature [Ca-1][Fe-1] [Fe-2].

La technique ADBQUICKEST est une nouvelle version de la TVD (Totale Variation Diminution) du schéma Quickest. Elle a été présentée pour la première fois dans la littérature en 2009 par Ferreira VG et Kurokawa [Fe-1]. Ils ont discrétisé l'équation de continuité en utilisant la méthode de différences finies en troisième ordre en espace. L'écriture de l'équation de continuité en utilisant ce type de discrétisation est intitulée l'algorithme Quickest.

Le couplage du schéma Quickest avec le flux limiteur ADBQUICKEST présente une meilleure alternative pour résoudre les problèmes tridimensionnels liés aux équations de transport de type Dérive-Diffusion.

Cette technique est basée sur le calcul des flux par l'équation :

$$\Phi_{i+1/2}^k = \frac{n_{i+1}^k + n_i^k}{2} - \frac{c}{2} (n_{i+1}^k - n_i^k) - \frac{(1-c^2)}{6} (n_{i+1}^k - 2n_i^k + n_{i-1}^k) \quad (3)$$

C : est le nombre de courant (critère de Friedrich-Levy) donné par l'expression:

$$c = c_{i+1/2} = w_{i+1/2} \frac{\Delta t}{\Delta x}$$

L'utilisation des flux $\Phi_{i+1/2}^k$ dans le schéma numérique peut générer l'apparition de nouveaux maximums de densités et réintroduire ainsi des densités négatives. Ceci est le rôle du Flux Limiteur qui doit le réaliser en respectant la non création de nouveaux extremums, ni l'accentuation des extrêmes déjà existants.

Le flux limiteur du schéma ADBQUICKEST est donné par l'expression:

$$\begin{aligned} \Phi_{i+1/2}^k &= \max(0, A) \\ A &= \min\left(2r_{i+1/2}^k, \frac{2 + c^2 - 3|c| + (1 - c^2)r_{i+1/2}^k}{3 - 3|c|}, 2\right) \end{aligned} \quad (4)$$

La technique ADBQUICKEST est développée, aussi, comme suit:

Soient les équations (1 et 2) que nous pouvons écrire de la façon suivante:

$$\begin{aligned} n_i^{k+1} - n_i^k &= -\left(\frac{c_{i+1/2}}{\Delta t} B\right) \\ B &= \int_0^{\Delta t} n(x_{i+1/2}, t) dt - \frac{c_{i-1/2}}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} n(x_{i-1/2}, t) dt \end{aligned} \quad (5)$$

Si nous considérons que la vitesse est constante à l'intérieur de chaque intervalle, l'équation (5) s'exprime uniquement en terme des densités n et du nombre de courant $c = c_{i+1/2}$, il vient que:

$$n_i^{k+1} - n_i^k = -c (n_{i+1/2}^k - n_{i-1/2}^k) \quad (6)$$

$$\text{Avec : } n_{i\pm 1/2}^k = \frac{1}{\Delta t} \int_0^{\Delta t} n(x_{i\pm 1/2}, t) dt \quad (7)$$

Il s'en suit que $n_{i+1/2}^k$ et $n_{i-1/2}^k$ représentent les valeurs moyennes prises sur l'intervalle de temps Δt des densités au centre de chaque cellule.

L'objectif principal de la technique ADBQUICKEST est de contrôler les valeurs de $n_{i+1/2}^k$ et $n_{i-1/2}^k$ issues du schéma QUICKEST, afin de rendre le schéma strictement positif et de manière à ce qu'aucun maximum ou minimum n'apparaisse sur l'intervalle de temps.

Dans ce qui suit, nous allons effectuer des tests numériques sur l'algorithme utilisé dans ce travail. Ces tests vont nous permettre de choisir l'algorithme qui respecte le plus fidèlement les critères cités précédemment.

Cette expérience numérique sera effectuée en faisant propager le profil de la densité avec une vitesse constante pendant une période T . La résolution de l'équation de continuité (sans terme de diffusion et avec un terme source nul) est effectuée pour un nombre de point n_x suivant l'axe de propagation égal à 500.

Le schéma numérique doit être capable de suivre le plus fidèlement possible la distribution analytique de la densité initiale $n(x,t)$ multiforme ; rectangulaire, gaussienne, et triangulaire avec une vitesse de dérive constante. Cette densité est donnée à l'instant initial par l'expression suivante:

$$n(x, t=0)=10 \text{ (ua)} \quad \text{pour } 0.05 < x < 0.25 \text{ (ua)}$$

$$n(x, t=0)=10 * (\exp(-300 * (x-0.2)^2)) \text{ (ua)} \quad \text{pour } 0.35 < x < 0.65 \text{ (ua)}$$

$$n(x, t=0)=100 x - 75 \quad \text{pour } 0.75 < x < 0.85 \text{ (ua)}$$

$$n(x, t=0)=-100 x + 95 \quad \text{pour } 0.85 < x < 0.95 \text{ (ua)}$$

$$n(x, t=0)=0 \quad \text{dans le reste de l'intervalle. La vitesse de propagation constante } W(x) \text{ est égale à } 10 \text{ (ua).}$$

La figure (1) représente les résultats calculés à l'instant $t=T$ pour une vitesse de propagation constante. Le nombre de points n_x est égal à 500 et l'intervalle inter-électrodes est égal à 1 (ua).

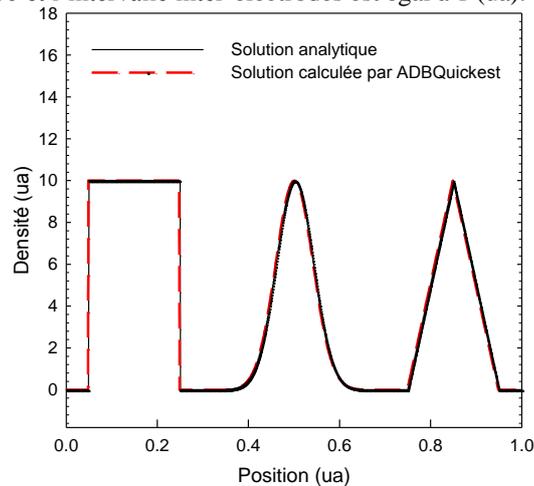


Fig. 1 : Solutions calculées après une période T .

Nous remarquons que le profil de la solution calculée par le schéma numérique ADBQUICKEST est en concordance avec le profil de la solution analytique.

5. Application du schéma numérique ADBQUICKEST aux équations de transport

a. Résolution monodimensionnelle

En raison de ses qualités de stabilité, de précision et de rapidité par rapport aux techniques numériques, on peut dire que l'utilisation de la méthode ADBQUICKEST a permis d'ouvrir de nouvelles perspectives pour la modélisation des décharges hors équilibre.

On se propose de résoudre les équations de conservation des porteurs de charge (électrons, ions) en géométrie cartésienne. On choisit pour illustrer le formalisme, la configuration plan-plan des électrodes.

Afin de valider notre schéma numérique basé sur l'algorithme ADBQUICKEST, nous étudions le profil de densité solution dans le cas des situations tests où l'on connaît déjà la solution. Il s'agit de la propagation d'un profil de densité initiale de forme rectangulaire avec une vitesse de dérive $W(x)$ indépendante du temps et variable en fonction de la position selon la relation suivante :

$$W(x) = 1 + 9(\sin(\pi x))^8.$$

Cette vitesse présente donc un maximum pour la position $x=0,5$ qui est dix fois plus important que sa valeur au début et à la fin de l'intervalle en $x=0$ et $x=1$.

La distribution initiale de la densité $n(x,t)$ est telle que :

$$n(x, t=0)=10 \quad \text{pour } 0.05 < x < 0.25 \text{ (ua)}$$

$$n(x, t=0)=0 \quad \text{dans le reste de l'intervalle.}$$

La figure (2) représente la solution analytique en pointillés et la solution calculée en fonction de la position par l'algorithme ADBQUICKEST aux instants $0.4T$ et T , pour un nombre de points n_x sur l'intervalle de propagation égal à 501 points et un nombre de courant CFL égal à 10^{-3} .

On remarque que les solutions déterminées par ce schéma ne dépendent pas de la valeur du CFL. On constate aussi, que les profils de la solution calculée à $0.4T$ et à T sont quasi similaires aux profils de la solution analytique à ces instants. Le pic du profil de la solution analytique obtenu par Davies à $0.4 T$ a été presque atteint. Ce comportement est dû à la discontinuité aux bords du profil utilisé et à la correction faite par le schéma ADBQUICKEST qui assure l'élimination de tout extremum.

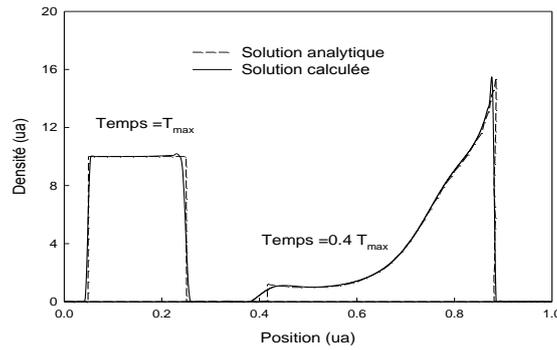


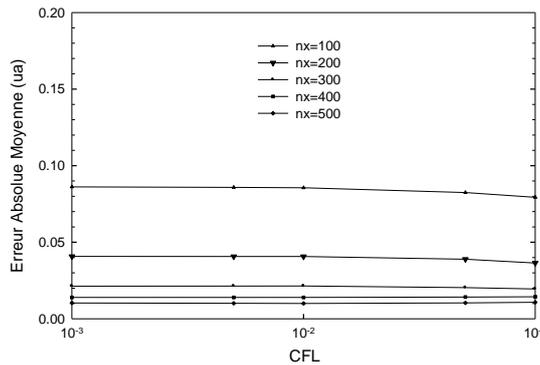
Fig. 2 Solutions calculées à t=0.4T et t=T pour une vitesse de propagation variable

Le calcul d'erreur, nous renseigne sur la précision et la qualité de la méthode utilisée. L'erreur absolue est calculée après une période T en fonction de la position et la valeur du CFL (de 10⁻³ à 10⁻¹). Le choix de ces deux valeurs extrêmes du CFL, est justifié par les différentes recherches faites dans la littérature, [6].

Cette erreur est donnée par l'équation suivante:

$$A. E = \frac{1}{nx} \sum_{i=1}^{nx} \left| n_i^{période} - n_i^{analytique} \right|$$

La figure (3) représente la variation de l'erreur absolue moyenne en fonction du CFL pour plusieurs valeurs de nombre de points nx (de 101 à 501 points).



(7)

Fig. 3 Erreurs absolues moyennes issues de l'algorithme ADBQUICKEST

Nous pouvons remarquer que la valeur de l'erreur absolue moyenne est quasiment indépendante du CFL et inversement proportionnelle au nombre de point nx. Nous pouvons conclure que la technique ADBQUICKEST est un schéma conservatif.

b. Résolution bidimensionnelle

L'extension de la résolution monodimensionnelle précédente pour deux dimensions en coordonnées cylindriques, peut s'envisager en utilisant la méthode dite (à pas fractionnaires ; Time Splitting). Cette méthode revient à considérer que le problème numérique à deux dimensions décrit par l'équation suivante:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial nw}{\partial z} - \frac{\partial}{\partial z} D \frac{\partial n}{\partial z} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \left(r \cdot \left(nw - D \frac{\partial n}{\partial r} \right) \right)}{\partial r} = S \tag{8}$$

peut se réduire à une succession de problèmes à une dimension dans l'espace [Be-2][Hu-1][Kr-1] [Po-4]. Cela signifie que le transport des particules qui s'effectue dans l'espace et dans le temps de manière synchrone et liée, s'effectuera de manière séparée en résoudant en premier lieu l'équation de transport selon la direction axiale:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial nw_z}{\partial z} = 0 \tag{9}$$

La densité calculée est introduite pour la résolution de cette équation selon la direction radiale:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{1}{r} \cdot \frac{\partial \left(r \cdot \left(nw_r \right) \right)}{\partial r} = S \tag{10}$$

Avec: wz et wr les vitesses de dérive axiale et radiale. Le coefficient de diffusion est considéré nul.

Pour valider notre schéma numérique en 2D, nous allons utiliser les paramètres de calcul proposés par Kulikovsky. Il s'agit de suivre l'évolution spatiotemporelle d'une densité initiale de forme connue. Le coefficient de diffusion et le terme source sont nuls. Les vitesses de dérive axiale et radiale sont identiques aux celles utilisées par Kulikovsky [7].

La densité initiale de profil gaussien utilisée dans ce test est donnée par l'expression suivante :

$$n(z, r, t = 0) = n_1 \cdot \exp\left(-\frac{(z - z_0)^2 + (r - r_0)^2}{\sigma^2}\right)$$

Pour laquelle; les valeurs de n_1 , z_0 , r_0 , σ^2 sont données respectivement comme suit: 10^{12} , 0.9, 0.9, 0.04 en unités arbitraires (ua)

La figure 4 montre le profil gaussien de la densité initiale présentée en 2D en unité arbitraire.

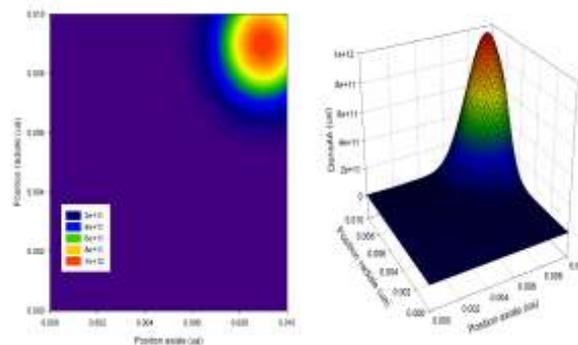


Fig. 4 La densité initiale de profil gaussien en unité arbitraire.

La propagation de la densité sur la diagonale est due aux vitesses de dérive axiale et radiale de valeurs égales. Ce profil de la densité propagée, comme le montre la figure "Fig 5", est en concordance avec celui trouvé par le schéma amélioré Scharfetter –Gummel SG0 utilisé dans la thèse de Benaired [8].

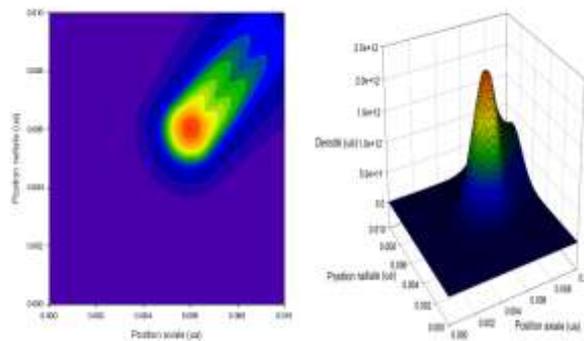


Fig. 5 Propagation de la densité de profil gaussien selon la direction diagonale.

6. Conclusion

L'objectif de cette étude était de mettre au point un modèle numérique performant pour la résolution des équations de transport en géométrie bidimensionnelle. Cela va nous permettre d'étudier la dynamique des particules chargées dans le cas des décharges électriques à haute pression, en vue d'une meilleure compréhension de l'évolution et de la propagation des ondes d'ionisation dans des situations de fortes variations de densité et de champ électrique.

7. Références

- [1] Chao, B., Spatially hybrid computations for streamer discharges: arXiv:1103.2148v1 [physics.plasm-ph] 2011
- [2] Dhali S. and Williams P. J. Appl. Phys., 62. (1987).
- [3] A.Kulikovsky, "A More Accurate Scharfetter-Gummel Algorithm", J.Compt. Phys., 119, 1995.
- [4] Kulikovsky A. J. Phys. D: Appl. Phys. 30 441–50. 1997.
- [5] N. Benaired. Thèse de doctorat. USTO 2013
- [6] Bessieres. Thèse de doctorat. Université Aldour. 2006.
- [7] Potin J., Thèse de doctorat. Université P. Sabatier. 2001.
- [8] Hundsdorfer. Journal of Computational and Applied Mathematics 201 146 – 152. 2007.

[9] N. Benaired and A. Hennad, *Przegląd Elektrotechniczny*, ISSN 0033-2097, R. 89. NR: 1a/2013