

Table des matières

Introduction	5
1 Dérivation et implémentation du modèle SHE	9
1.1 Description des collisions en volume et aux parois	9
1.1.1 Phénomènes aux parois	10
1.1.2 Collisions en volume	11
1.2 Dérivation du modèle SHE avec collisions en volume	12
1.2.1 Hypothèses de départ	12
1.2.2 Equation de Boltzmann avec opérateur de réflexion à la paroi . .	13
1.2.3 Asymptotique	16
1.3 Collisions aux parois	30
1.3.1 Nombre moyen d'électron réémis	30
1.3.2 Prise en compte des réflexions spéculaire et diffusive dans le modèle SHE	32
1.3.3 Attachement	32
1.3.4 Emission secondaire	33
1.4 Collisions en volume	40
1.4.1 Sections efficaces de collision	40
1.4.2 Excitation	40
1.4.3 Ionisation	43
1.5 Expression analytique du coefficient de diffusion	50
1.5.1 Calcul de $D^B(r, \omega)$ dans le cas isotrope	50
1.5.2 Calcul de l'intégrale de D^B	56
1.6 Conditions aux limites de Robin	59
1.6.1 Problème stationnaire modèle	59
1.6.2 Conditions aux limites d'ordre 1	60
1.6.3 Correcteur de couche limite	61
1.6.4 Conditions aux limites d'ordre 2	63
1.6.5 Approximation de la longueur d'extrapolation	65
1.7 Calcul pratique du coefficient de diffusion	67
1.7.1 Tabulation d'un intégrale dépendant d'un seul paramètre . . .	68
1.7.2 Réduction du coefficient par passage à la limite	69
1.7.3 Alternative aux formules de quadrature	72

1.8	Discrétisation du modèle SHE	72
1.8.1	Problème à résoudre	73
1.8.2	Discrétisation	77
1.9	Résultats numériques	81
1.9.1	Intérêt en physique	83
1.9.2	Résultats typiques	84
2	Electron Transport in Stationary Plasma Thrusters	87
3	Numerical Simulation of Electron Transport in Stationary Plasma Thrusters	107
4	Diffusion dynamics of an electron gas confined between two plates	139
5	Résolution d'un problème elliptique	169
5.1	Problème elliptique fortement anisotrope	169
5.1.1	Définition du problème	170
5.1.2	Anisotropie	171
5.1.3	Directions propres variables	172
5.2	Méthode de volumes finis sur maillage cartésien	172
5.2.1	Discrétisation par volumes finis	173
5.2.2	Approximation des courants sur les arêtes en maillage cartésien	175
5.2.3	Conditions aux limites	177
5.2.4	Second membre donné par une divergence	178
5.2.5	Résolution du système linéaire	179
5.3	Test de la méthode	180
5.3.1	Principe des tests	180
5.3.2	Résultats numériques	182
5.3.3	Conclusions du test	183
5.4	Une technique de paramétrisation, motivation et applications	185
5.5	Paramétrisation appliquée au problème elliptique anisotrope	186
5.5.1	Paramétrisation des matrices de conductivité	186
5.5.2	Discrétisation	187
5.5.3	Résolution	190
5.6	Résultats numériques	191
5.6.1	Comparaison avec des solutions approchées	191
5.6.2	Conclusion des tests	195
Conclusion		199

Introduction

L'objet de cette thèse est de contribuer à l'étude de deux problèmes en transport de particules chargées intervenant dans la modélisation d'un propulseur ionique. Le premier travail consiste en la dérivation et l'approximation numérique d'un modèle de diffusion de type 'Spherical Harmonics Expansion' (SHE) sous l'influence combinée de collisions en surface et en volume. Le second travail est la simulation par une méthode de volume finis d'un problème elliptique fortement anisotrope.

Les moteurs ioniques de type SPT

Un moteur de type Stationary Plasma Thruster (SPT) est constitué d'une cavité comprise entre deux cylindres de céramique. Un champ électrique est établi selon l'axe des cylindres (cf figure 1). Il accélère vers l'anode les électrons émis par deux cathodes creuses¹ (en haut de la figure 1). A cette anode est injecté du Xénon (Xe), qui est ionisé par les électrons durant son séjour dans la cavité. Les ions Xe^+ sont alors accélérés vers le plan de sortie par le champ électrique. A leur sortie (près des cathodes creuses) les ions positifs sont neutralisés par des électrons et la masse éjectée est donc neutre. De plus, un champ magnétique est établi dans la direction radiale afin de maximiser la probabilité de collision avec les atomes de Xénon.

Le contrôle de la trajectoire de satellites est généralement assuré par la détente de gaz brûlés, mais dans un avenir proche, ce procédé semble devoir céder la place à des propulseurs ioniques, qui permettent de réduire la masse au lancement du satellite. Le Stationary Plasma Thruster (SPT) apparaît comme l'un des propulseurs les plus intéressants pour l'intégration dans les satellites de télécommunications, tant pour ses performances, économisant plus de 800 kg sur un satellite de 3500 kg d'une durée de vie de 15 ans, que pour la durée de vie démontrée (plus de 7000 heures). Nous renvoyons le lecteur à [24] par exemple pour une description plus détaillée du fonctionnement des SPT et des intérêts de la propulsion ionique.

Modèle SHE pour le transport des électrons dans un SPT

Le premier problème auquel nous avons contribué est le calcul de la distribution en énergie des électrons. Dans [3, 7] on peut constater que cette distribution est loin d'être

¹Les cathodes creuses sont des dispositifs qui sont capables d'émettre des électrons dans le vide avec une grande efficacité.

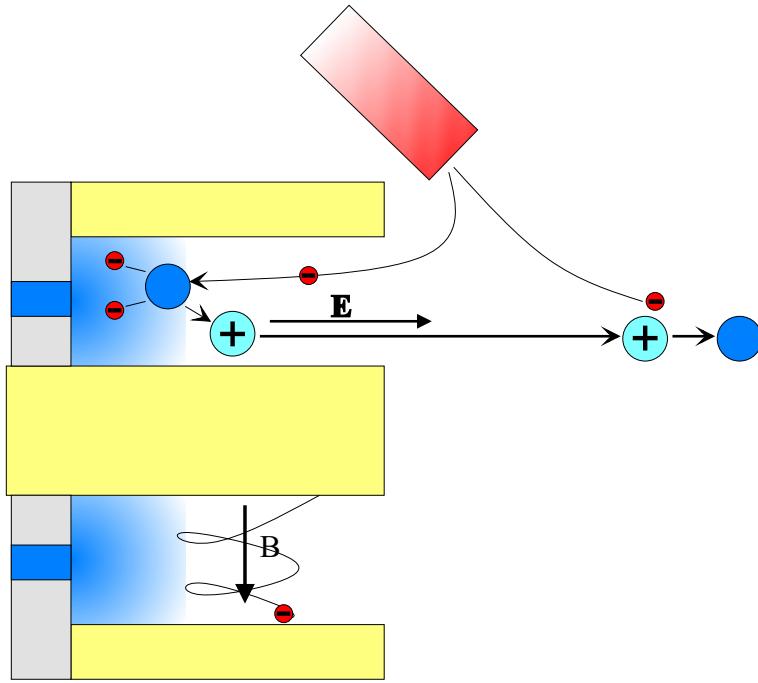


FIG. 1 – Principe du SPT

Maxwellienne, aussi il est nécessaire de simuler le transport des électrons. Toutefois, le coût de ce calcul a motivé la recherche d'un modèle SHE [15], qui est un modèle de diffusion dans les variables de position et d'énergie. Ce modèle prend en compte les collisions des électrons avec la paroi, qui permettent aux électrons de diffuser vers l'anode, et il donne une approximation de la fonction de distribution en énergie des électrons.

Dans un premier temps nous avons participé à la modélisation des collisions inélastiques à la paroi [16] et nous avons écrit un programme de simulation du modèle SHE dans ce cas. De plus, en suivant [4, 20], nous avons introduit des conditions aux limites de type Robin, qui permettent d'obtenir une meilleure approximation de la fonction de distribution des électrons [4, 42]. Puis nous avons participé à l'extension de ce modèle au cas où l'on prend en compte les collisions en volume. Les différences avec [15] tiennent essentiellement au calcul du coefficient de diffusion du modèle SHE, et à la modélisation des collisions en volume. Enfin nous avons complété la simulation numérique du modèle en y incorporant les collisions en volume, ainsi qu'un calcul efficace du coefficient de diffusion.

Le **chapitre 1** détaille une partie des chapitres 2, 3 et 4. Afin de fixer le vocabulaire, nous y faisons l'inventaire des phénomènes pris en compte pour la modélisation des électrons dans la cavité. Puis nous reprenons les calculs de [15] dans une géométrie simplifiée, mais en y ajoutant la prise en compte des collisions en volume. Après avoir décrit la modélisation des collisions aux parois et en volume, nous détaillons le calcul du coefficient de diffusion, et nous justifions l'emploi de conditions aux limites de Robin.

Enfin, nous esquissons le calcul pratique du coefficient de diffusion et la discréétisation du modèle, pour aboutir à quelques exemples numériques. Nous obtenons des résultats comparables aux simulations utilisant une méthode de Monte Carlo, et le code s'exécute en quelques minutes² là où la méthode Monte Carlo nécessite plusieurs heures.

Dans le **deuxième chapitre**, publié dans *Transport Theory and Statistical Physics* [16], la dérivation du modèle sans collision en volume est rappelée, ainsi que la modélisation des phénomènes inélastiques survenant aux parois. Quelques résultats numériques montrent que la démarche mérite d'être développée.

Le modèle a donc été étendu pour prendre en compte les collisions en volume. Dans le **troisième chapitre**, soumis à *Plasma Sources Science and Technology*, le modèle macroscopique et le modèle Monte Carlo tenant compte des phénomènes volumiques sont brièvement décrits. Nous proposons alors une série de tests sur différentes grandeurs obtenues à partir des simulations afin de valider et de comparer les deux approches. Enfin, nous exploitons les codes de calcul afin de tester des hypothèses sur la distribution électronique.

Dans le **quatrième chapitre**, à paraître dans *Methods and Applications of Analysis*, une assise théorique au modèle SHE est donnée dans un cas simplifié. Notre participation à ce chapitre se situe essentiellement au niveau du calcul de coefficient de diffusion en présence de collisions volumiques. Comme dans [15], il est possible d'en donner une expression analytique.

Problème elliptique fortement anisotrope

Dans un deuxième temps, nous nous sommes attaqués au calcul du potentiel électrique en deux dimensions. Le potentiel électrique se déduit de l'équation de conservation de la charge. Toutefois, la présence du champ magnétique impose que le courant d'électrons soit lié au potentiel électrique par :

$$\mathcal{J}(x, y) = -\sigma(x, y) \nabla W(x, y)$$

où σ est une matrice dont les valeurs propres sont les conductivités le long du champ magnétique et perpendiculairement au champ. De ce fait, nous devons résoudre un problème elliptique anisotrope au lieu de l'équation de Poisson. Qui plus est, l'intensité du champ magnétique confine fortement les électrons le long de ses lignes de champ, c'est-à-dire que le rapport des valeurs propres de σ est élevé (nous dirons que la conductivité est fortement anisotrope). Comme nous le verrons, des difficultés numériques apparaissent lorsque l'anisotropie est forte.

Pour simuler ce problème, nous nous sommes d'abord attachés à mettre au point une méthode de volumes finis dans le cas général où les directions propres de σ sont variables, ce qui nous distingue des cas habituellement traités [1, 39]. Nous obtenons des simulations très satisfaisantes lorsque l'anisotropie est faible et nous constatons une dégradation des résultats lorsque l'anisotropie augmente. C'est pourquoi, en s'inspirant de [28, 43], nous avons mis au point une méthode de paramétrisation. L'idée principale de

²Compaq Alpha ev6@500MHz

cette méthode consiste à se ramener au problème isotrope, et à calculer les coefficients du développement de Taylor par rapport au paramètre d'anisotropie, afin d'approcher la solution du problème anisotrope.

La **chapitre 5** traite de ce problème. Nous entamons ce chapitre par la définition du problème elliptique anisotrope que nous souhaitons résoudre, et nous mettons en exergue les difficultés posées par la physique du SPT. Nous présentons alors une méthode de volumes finis destinée à résoudre le problème de diffusion anisotrope en deux dimensions. Nous montrons ensuite quelques tests numériques destinés à connaître le domaine de validité de la résolution. Dans la deuxième moitié de ce chapitre, nous définissons une paramétrisation qui nous permet de nous ramener au problème isotrope. Nous décrivons comment extrapoler la solution du problème anisotrope et nous terminons par des tests numériques.

Chapitre 1

Dérivation et implémentation du modèle SHE

Nous avons participé à la mise au point d'un modèle SHE pour la simulation d'une population d'électrons dans un SPT. Dans ce chapitre, nous décrivons de manière détaillée les idées et les calculs qui nous conduisent à ce modèle, puis nous donnons les grandes lignes de la discréétisation.

Dans le première section, nous passons en revue les phénomènes physiques que nous avons cherché à modéliser. Puis nous reprenons la démarche de [15] pour obtenir le modèle SHE, avec quelques adaptations pour les collisions inélastiques aux parois (dont les résultats ont été publiés dans [16] et repris dans le chapitre 2) et pour les collisions en volume ([17] et repris dans le chapitre 3). Dans la troisième et la quatrième section, nous explicitons la mise au point des modèles pour les collisions aux parois, et pour les collisions en volume. Dans le chapitre 4 ([19]), nous reportons une façon élégante de calculer le coefficient de diffusion défini par le modèle SHE. Le calcul originel est beaucoup plus lourd mais il amène une expression directement exploitable du coefficient, aussi nous avons choisi de le donner aussi, dans la section 1.5. Dans la section 1.6 nous donnons les résultats quant aux conditions aux limites à imposer, qui proviennent de la construction d'un correcteur de couche limite [4, 14]. Enfin dans les trois dernières sections, nous présentons le calcul pratique du coefficient de diffusion, la discréétisation du modèle, et quelques résultats numériques.

1.1 Description des collisions en volume et aux parois

Dans cette section nous présentons l'ensemble des collisions dont nous avons tenu compte dans le modèle SHE. Ceci nous permettra de situer le vocabulaire en même temps que nous mettrons en exergue quelques questions qui se posent lors de la modélisation de ces phénomènes.

Dans la cavité d'un propulseur, un électron tourne autour des lignes de champ magnétique. Sauf exception, il va voyager d'une paroi à l'autre. Entre les deux parois il

peut participer à des collisions (dites volumiques par opposition aux collisions avec les parois) avec des atomes de Xénon et lorsqu'il rencontre une paroi, ses interactions avec elle seront diverses (selon son énergie).

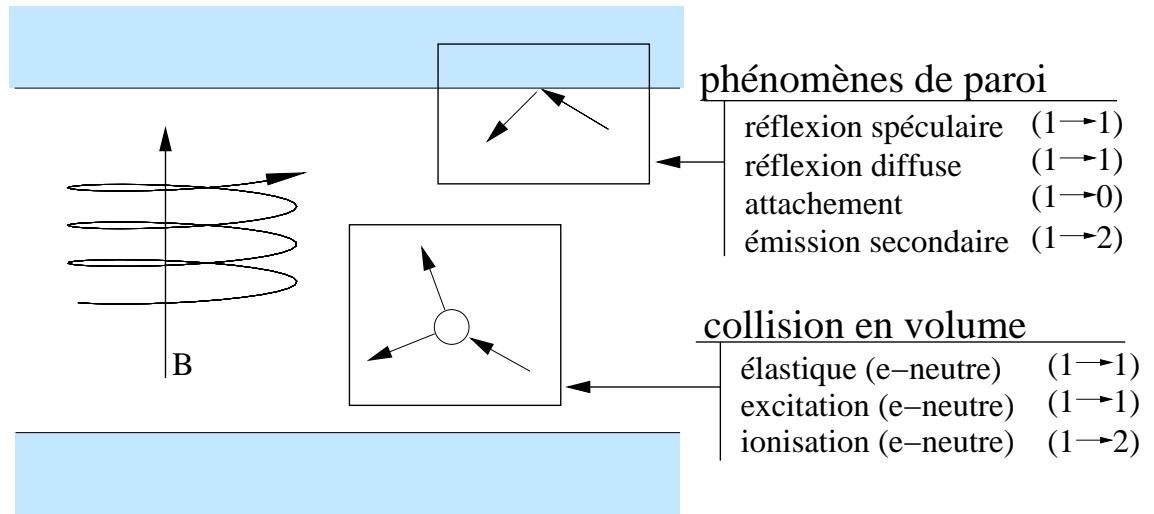


FIG. 1.1 – Phénomènes décrits et bilan électronique

1.1.1 Phénomènes aux parois

Nous donnons ici une brève description des phénomènes envisagés lors de la rencontre d'un électron avec l'une des deux parois.

réflexion spéculaire

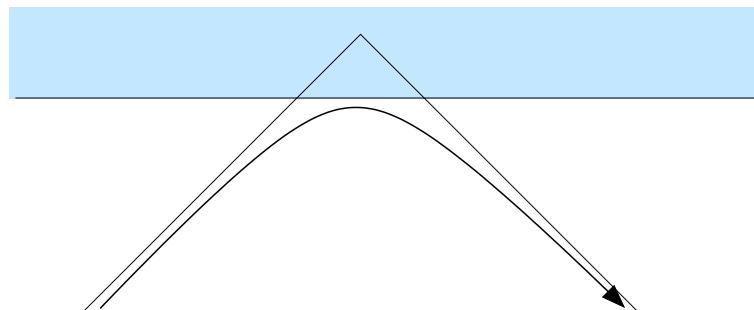


FIG. 1.2 – réflexion spéculaire

On parle de réflexion spéculaire lorsqu'un objet est réfléchi à la manière d'un rayon lumineux sur un miroir plan. Dans le cas général, un électron réfléchi par la paroi l'est

dans une direction aléatoire, compte tenu notamment de l'incertitude sur l'état de surface de cette paroi. Pourtant on peut parler dans un cas de réflexion spéculaire. En effet, la différence de mobilité entre les ions positifs et les électrons dans un plasma confiné par des parois crée un défaut de neutralité près de celles-ci. On appelle “gaine du plasma” la zone où le défaut de neutralité est importante. Cette gaine se manifeste par un potentiel petit, mais non négligeable devant l'énergie des électrons, qui repousse ceux-ci de la paroi. De ce fait, un électron d'énergie plus faible que l'énergie nécessaire à dépasser le potentiel aura l'air d'être réfléchi spéculairement par une paroi dont la position ne coïncide pas (en général) avec celle de la paroi matérielle, mais suffisamment proche pour que l'on considère que c'est la paroi elle-même qui a réfléchi l'électron (cf figure 1.2).

réflexion diffuse

Si un électron a suffisamment d'énergie pour surmonter le potentiel de gaine, il sera généralement réfléchi diffusivement. Une réflexion diffuse est le résultat de l'interaction d'un électron incident avec les nuages électroniques des atomes de la paroi. L'électron est réémis *avec la même énergie* dans une direction aléatoire. Comme il a eu à traverser la gaine, il arrive à la paroi avec une énergie diminuée du potentiel de gaine, mais cette énergie lui est restituée lors de sa traversée de la gaine dans l'autre sens.

attachement

Des expérimentations montrent que lorsqu'un électron a une énergie faible (mais suffisante pour vaincre le potentiel de gaine), il a tendance à être capturé par la paroi. En d'autres termes, certains électrons ne repartent pas de la paroi, ce qui aura pour effet de diminuer le nombre d'électrons de faible énergie.

émission secondaire

A l'inverse, un électron énergétique (de l'ordre de la centaine d' eV) aura tendance à libérer un électron de la paroi. Dans ce cas, deux électrons repartent de la paroi pour un électron incident. Il est rare que plus d'un électron soit arraché avec la gamme d'énergies des électrons incidents considérée, et nous considérons que ce n'est jamais le cas. Une question importante dans la modélisation de l'émission secondaire tient à la manière dont se répartit l'énergie de l'électron incident entre les deux électrons réémis. Comme nous le décrirons plus en détail dans la section 1.3.4, nous avons supposé que l'un des électrons conserve la presque totalité de l'énergie de l'électron incident, et que l'autre électron emporte le reste.

1.1.2 Collisions en volume

Lors de son voyage entre les deux parois, un électron peut interagir avec les différentes espèces présentes. Nous avons tenu compte des principales collisions impliquant

des électrons et des atomes (appelées collisions électron-neutre), et négligé les éventuelles collisions entre les ions et les électrons.

collisions élastiques

Un atome n'a pas d'action électrostatique à longue distance, mais un électron s'approchant suffisamment près de son nuage électronique sera perturbé. Lorsque cette interaction ne perturbe que la trajectoire de l'électron sans modifier son énergie, on l'appelle collision élastique avec un neutre.

excitation

Un électron suffisamment énergétique peut céder une partie de son énergie Δ_e à un atome, qui change alors d'état pour s'appeler atome *excité*. Le nombre d'électrons est conservé mais par leur énergie. Il est à noter que l'énergie Δ_e est une constante (qui dépend de la structure de l'atome de Xénon) et qu'en particulier elle ne dépend pas de l'énergie de l'électron incident.

ionisation

A partir d'un seuil d'énergie (dit seuil d'ionisation), un électron est capable d'ioniser un atome, c'est-à-dire de libérer un électron du cortège électronique de l'atome¹. Son énergie est alors diminuée de l'énergie nécessaire à arracher un électron, et les deux électrons repartant de l'atome se partagent l'énergie restante. C'est sur ce phénomène que repose le principe du SPT ; le Xénon a été choisi pour le SPT entre autres pour son faible seuil d'ionisation (12 eV environ), ce qui favorise l'ionisation de la presque totalité des atomes durant leur traversée de la cavité.

1.2 Dérivation du modèle SHE avec collisions en volume

1.2.1 Hypothèses de départ

Nous considérons que la cavité du SPT est comprise entre deux cylindres de rayons R_0 et R_1 avec $R_0 < R_1$, et est de longueur L . Nous négligeons toutes les dépendances en θ (voir [15] pour la dérivation du modèle lorsqu'elles sont prises en compte), aussi nous notons le vecteur position $\hat{x} = (\hat{r}, \hat{z})$ et nous considérons la cavité $(\hat{r}, \hat{z}) \in [R_0, R_1] \times [0, L]$.

Nous nous plaçons dans la situation où le champ électrique est purement axial $\vec{E} = E(\hat{z})\vec{e}_z$ et le champ magnétique est purement radial $\vec{B} = \hat{B}(\hat{r}, \hat{z})\vec{e}_r$. Encore une fois, la situation où le champ électrique possède une composante azimuthale non nulle est

¹Nous ne considérons que les ions positifs. Les ions négatifs résulteraient de la capture d'un électron par un atome mais ils sont exceptionnels dans la situation qui nous occupe.

explorée dans [15]. Le champ électrique est orienté suivant les \hat{z} croissants, i.e. l'anode est située en $\hat{z} = 0$ et la cathode en $\hat{z} = L$.

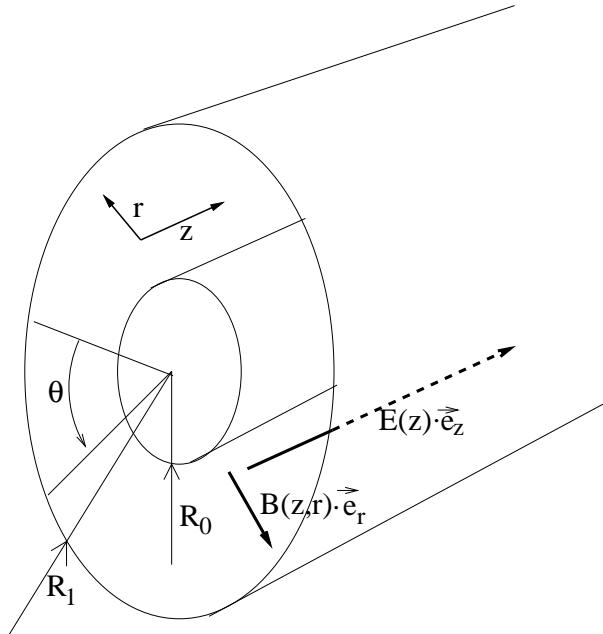


FIG. 1.3 – Géométrie et notations

1.2.2 Equation de Boltzmann avec opérateur de réflexion à la paroi

Soit $\hat{f}(\hat{x}, \hat{v}, \hat{t})$ la fonction de distribution des électrons, dépendant du vecteur position $\hat{x} = (\hat{r}, \hat{z}) \in [R_0, R_1] \times [0, L]$, du vecteur vitesse $\hat{v} = (\hat{v}_r, \hat{v}_\theta, \hat{v}_z) \in \mathbb{R}^3$ et du temps \hat{t} . L'objet de cette section est de fournir un modèle décrivant l'évolution de $\hat{f}(\hat{x}, \hat{v}, \hat{t})$. Ce modèle fera ensuite l'objet d'une analyse asymptotique dans la section 1.2.3.

Equation de Boltzmann

Dans le volume entre les deux parois, les électrons sont soumis à des collisions avec les atomes, et au transport sous l'influence des champs électriques et magnétiques. Pour modéliser cette situation, la fonction de distribution \hat{f} est soumise à l'équation :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{t}} + \hat{v}_r \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{r}} + \hat{v}_z \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{z}} + \frac{\hat{v}_\theta^2}{\hat{r}} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{v}_r} \\ - \left(\frac{\hat{v}_r \hat{v}_\theta}{\hat{r}} + \frac{q}{m} \hat{v}_z \hat{B}(\hat{r}, \theta, \hat{z}) \right) \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{v}_\theta} \\ + \frac{q}{m} (-\hat{E}(\theta, \hat{z}) + \hat{v}_\theta \hat{B}(\hat{r}, \theta, \hat{z})) \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{v}_z} = \mathbf{Q}_{elas}(\hat{f}) + \hat{\mathbf{Q}}_{exc}(\hat{f}) + \hat{\mathbf{Q}}_{ion}(\hat{f}), \end{aligned} \quad (1.1)$$

où $q > 0$ et m sont la charge et la masse d'un électron.

Au second membre, l'opérateur $\hat{\mathbf{Q}}_{elas}(\hat{f})$ modélise les collisions élastiques des électrons contre les atomes. Nous avons adopté la forme suivante, qui modélise la relaxation de \hat{f} avec le temps caractéristique $\hat{\tau}_{elas}$ (dit temps de relaxation) vers sa moyenne angulaire $[\hat{f}] = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} \hat{f}(\hat{x}, |\hat{v}| \omega, \hat{t}) d\omega$, où la direction de la vitesse $\omega = \hat{v}/|\hat{v}|$ appartient à \mathbb{S}^2 la sphère unité de \mathbb{R}^3 :

$$\hat{\mathbf{Q}}_{elas}(\hat{f}) = - \left(\frac{\hat{f} - [\hat{f}]}{\hat{\tau}_{elas}} \right). \quad (1.2)$$

De plus, nous introduisons deux opérateurs $\hat{\mathbf{Q}}_{exc}(\hat{f})$ et $\hat{\mathbf{Q}}_{ion}(\hat{f})$ qui modélisent l'excitation et de l'ionisation, et qui seront détaillés plus loin.

Collisions avec les parois

Dans la suite, nous noterons avec les indices 0 et 1 les fonctions et coefficients relatifs aux parois situées en R_0 (interne) et R_1 (externe). Comme dans [15], nous définissons les traces correspondant aux particules sortant et rentrant dans le domaine :

$$\hat{f}_0^+ = \hat{f}|_{\{\hat{r}=R_0, \hat{v}_r < 0\}}, \quad \hat{f}_0^- = \hat{f}|_{\{\hat{r}=R_0, \hat{v}_r > 0\}}, \quad (1.3)$$

et de la même façon en changeant la direction de \hat{v}_r :

$$\hat{f}_1^+ = \hat{f}|_{\{\hat{r}=R_1, \hat{v}_r > 0\}}, \quad \hat{f}_1^- = \hat{f}|_{\{\hat{r}=R_1, \hat{v}_r < 0\}}, \quad (1.4)$$

ce qui s'écrit sous une forme condensée

$$\hat{f}_i^+ = \hat{f}|_{\{\hat{r}=R_i, \hat{\sigma}_i v_r > 0\}}, \quad \hat{f}_i^- = \hat{f}|_{\{\hat{r}=R_i, \hat{\sigma}_i v_r < 0\}}, \quad (1.5)$$

avec $\sigma_0 = -1$ et $\sigma_1 = +1$.

Décrivons à présent la modélisation de la réflexion des électrons aux parois ; nous donnons les résultats pour la paroi interne, et leur extension pour l'autre paroi est obtenue en inversant les vitesses radiales \hat{v}_r . Dans la suite, nous notons de façon simplifiée $f(v) = f(x, v, t)$.

La modélisation des collisions aux parois consiste à proposer une relation entre les électrons sortant du domaine et les électrons y rentrant, c'est-à-dire de prédire $\hat{f}_0^-(\hat{v})$ à partir de \hat{f}_0^+ . Dans [4], un modèle est proposé pour décrire une combinaison de réflexion spéculaire et diffuse sous la forme :

$$\hat{f}_0^-(\hat{v}) = (1 - \hat{\gamma}_0) \hat{f}_0^+(\hat{v}_*) + \hat{\gamma}_0 \hat{\mathcal{E}}_0 \hat{f}_0^+ \quad \forall \hat{v} \in \mathbb{R}^3, \hat{v}_r > 0, \quad (1.6)$$

où $\hat{v}_* = (-\hat{v}_r, \hat{v}_\theta, \hat{v}_z)$ est la vitesse spéculairement réfléchie et $\hat{\mathcal{E}}_0$ modélise la réflexion diffuse. Cet opérateur est défini par la donnée d'un noyau intégral :

$$\hat{\mathcal{E}}_0 \hat{f}_0^+(\hat{v}) = \int_{\{\omega' \in \mathbb{S}^2, \omega'_r < 0\}} K_0(\hat{z}, |\hat{v}|, \omega, \omega') \hat{f}_0^+ (|\hat{v}| \omega') d\omega', \quad \forall \hat{v} \in \mathbb{R}^3, \hat{v}_r > 0, \quad (1.7)$$

où $K_0(\hat{z}, |\hat{v}|, \omega, \omega')$, défini pour $\omega, \omega' \in \mathbb{S}^2, \omega_r > 0, \omega'_r < 0$, est positif et satisfait

Hypothèse 1 *Conservation de chaque particule :*

$$\int_{\{\omega \in \mathbb{S}^2, \omega_r > 0\}} K_0(\hat{z}, |\hat{v}|, \omega, \omega') |\omega_r| d\omega = |\omega'_r|, \quad \forall \omega' \in \mathbb{S}^2, \omega'_r < 0. \quad (1.8)$$

ainsi que

Hypothèse 2 *Relation de réciprocité :*

$$|\omega_r| K_0(\omega, \omega') = |\omega'_r| K_0(-\omega', -\omega), \quad \forall \omega, \omega' \in \mathbb{S}^2, \omega_r < 0, \omega'_r > 0. \quad (1.9)$$

La première hypothèse traduit la certitude qu'une (et une seule) particule sera réfléchie pour chaque particule incidente. En effet, si on considère que toutes les particules sont réfléchies diffusivement, c'est-à-dire

$$\hat{f}_0^-(\hat{v}) = \int_{\{\omega' \in \mathbb{S}^2, \omega'_r < 0\}} K_0(\hat{z}, |\hat{v}|, \omega, \omega') \hat{f}_0^+ (|\hat{v}| \omega') d\omega', \quad \forall \hat{v} \in \mathbb{R}^3, \hat{v}_r > 0,$$

alors (1.8) implique que

$$\int_{\{\omega' \in \mathbb{S}^2, \omega'_r < 0\}} \hat{f}_0^+ (|\hat{v}| \omega') |\omega'_r| d\omega' = \int_{\{\omega \in \mathbb{S}^2, \omega_r > 0\}} \hat{f}_0^- (|\hat{v}| \omega) |\omega_r| d\omega.$$

La seconde hypothèse suppose que la réflexion par la paroi est réversible : les propriétés du noyau intégral sont inchangées lorsque l'on inverse les directions d'incidence et de départ. Une discussion de ce type d'hypothèses peut être trouvée dans [10].

$\hat{\gamma}_0(\hat{v}) \in [0, 1]$ s'appelle le coefficient d'accommodation. Le modèle (1.6) indique qu'une part $\hat{\gamma}_0$ des électrons arrivant à la paroi sont réfléchis de manière diffuse, et que le reste est réfléchi spéculairement.

Afin d'ajouter à ce modèle les phénomènes inélastiques (attachement et émission secondaire), nous changeons (1.6) en (cf [16]) :

$$\hat{f}_0^-(\hat{v}) = (1 - \hat{\gamma}_0^e) \hat{f}_0^+(\hat{v}_*) + \hat{\gamma}_0^e \hat{\mathcal{E}}_0 \hat{f}_0^+ + \left(-\hat{\gamma}_0^a \hat{f}_0^+(\hat{v}_*) + \hat{\mathcal{S}}_0 \hat{f}_0^+ \right) \quad \forall \hat{v} \in \mathbb{R}^3, \hat{v}_r > 0. \quad (1.10)$$

où $\hat{\mathcal{S}}_0$ est l'opérateur d'émission secondaire défini par

$$\hat{\mathcal{S}}_0 \hat{f}_0^+(\hat{v}) = \int_{\substack{|v'| > |\hat{v}| \\ v'_r < 0}} \hat{\mathcal{S}}_0(v' \rightarrow \hat{v}) \hat{f}_0^+(v') dv'. \quad (1.11)$$

L'intégration est effectuée pour $|v'| > |\hat{v}|$ car on considère que les électrons ne peuvent que perdre de l'énergie lors d'une rencontre avec la paroi.

Similairement à (1.6), les coefficients $\hat{\gamma}_0^a \in [0, 1]$ et $\hat{\gamma}_0^e \in [0, 1]$ sont les nombres moyens d'électrons respectivement attachés à la paroi et réémis diffusivement. Nous postulons aussi que $0 \leq 1 - \hat{\gamma}_0^e - \hat{\gamma}_0^a \leq 1$. De fait, $(1 - \hat{\gamma}_0^e - \hat{\gamma}_0^a)$ représente la part d'électrons réfléchis spéculairement mais si $\hat{\gamma}_0^a > 0$, ce qui n'est possible que si $\hat{\gamma}_0^e < 1$, alors il peut y avoir des électrons attachés. Nous donnerons plus de détails sur l'émission secondaire et l'attachement dans la section 1.3.

Pour l'autre paroi, nous posons une relation très similaire où les vitesses radiales ont été inversées (les opérateurs $\hat{\mathcal{E}}_1$ et $\hat{\mathcal{S}}_1$ étant définis en conséquence) :

$$\hat{f}_1^-(\hat{v}) = (1 - \hat{\gamma}_1^e) \hat{f}_1^+(\hat{v}_*) + \hat{\gamma}_1^e \hat{\mathcal{E}}_1 \hat{f}_1^+ + \left[-\hat{\gamma}_1^a \hat{f}_1^+(\hat{v}_*) + \hat{\mathcal{S}}_1 \hat{f}_1^+ \right] \quad \forall \hat{v} \in \mathbb{R}^3, \hat{v}_r < 0. \quad (1.12)$$

Conditions aux bords $\hat{z} = 0$ et $\hat{z} = L$

Sur les couronnes $\hat{z} = 0$ et $\hat{z} = L$, nous prescrivons la partie entrante des fonctions de distribution :

$$\hat{f}|_{\hat{z}=0, v_z > 0} = F_0(\varepsilon), \quad \hat{f}|_{\hat{z}=L, v_z < 0} = F_L(\varepsilon) \text{ donnée.} \quad (1.13)$$

Cette condition aux limites sera affinée pour le modèle SHE, et nous proposerons une condition aux limites de type Robin dans la section 1.6.

1.2.3 Asymptotique

Dans [4], Bardos et al. ont étudié le comportement d'une population de particules confinée entre deux plans proches, et plus précisément la limite lorsque la distance entre les plans tend vers 0. Dans le SPT, nous adoptons une démarche similaire en considérant que la distance entre les deux cylindres limitant la cavité est petite, en suivant [15]. Ceci se traduit par l'adoption du petit paramètre :

$$\eta = \frac{R_1 - R_0}{R_0} \ll 1 \quad (1.14)$$

L'objectif est de s'appuyer sur ce petit paramètre pour déduire un problème de diffusion (le modèle SHE) du problème (1.1, 1.10, 1.12). Puisque nous avons négligé les variations en θ , la coordonnée axiale z sera la seule variable spatiale du modèle SHE.

Adimensionnement

Choix des échelles Pour aboutir à un problème de diffusion, il faut nous placer aux échelles correctes pour examiner (1.1, 1.10, 1.12). Nous avons pris les échelles suivantes [15].

D'après (1.14), l'échelle de variation de la coordonnée radiale est ηR_0 . Nous introduisons la variable adimensionnée $r \in [0, 1]$, définie par :

$$\hat{r} = R_0 (1 + \eta r). \quad (1.15)$$

Par contre, nous supposons que la longueur L de la cavité est du même ordre de grandeur que R_0 et nous posons :

$$\hat{z} = R_0 z, \quad (1.16)$$

$$l = \frac{L}{R_0}. \quad (1.17)$$

c'est-à-dire $z \in [0, l]$.

Soit E_0 l'échelle caractéristique du champ électrique, que nous prendrons en pratique égale à $\frac{\Phi_{total}}{L}$ où Φ_{total} est le potentiel appliqué entre l'anode et la cathode. Cette échelle induit la définition de la vitesse caractéristique des électrons, que nous prendrons

égale à la vitesse atteinte par un électron sur une distance R_0 (qui est l'échelle axiale) lorsqu'il est soumis à un champ d'intensité E_0 , i.e. $m V_0^2 = q E_0 R_0$, ou

$$V_0 = \sqrt{q E_0 R_0 / m}, \quad (1.18)$$

Pour choisir l'échelle B_0 du champ magnétique, nous considérons le rayon de Larmor des électrons tournant autour des lignes de champ $r_L = \frac{m V_0}{q B_0}$. Le champ magnétique a pour rôle de confiner les électrons et pour cela il doit être suffisamment fort. Il faut que le rayon de Larmor soit au moins aussi petit que l'espace entre les cylindres, i.e. $r_L \approx \eta R_0$ et nous choisissons donc $B_0 = m V_0 / q R_0 \eta$, qui s'écrit aussi :

$$B_0 = \frac{E_0}{\eta V_0}.$$

Enfin, nous donnons les échelles caractéristiques de temps. Nous considérons que les électrons traversent l'espace entre les deux cylindres avec la vitesse V_0 , donc le temps nécessaire à la traversée vaut

$$t_{V_0} = \frac{\eta R_0}{V_0}$$

Pour le temps de relaxation, qui représente le temps moyen entre deux collisions, nous adoptons t_{V_0} comme échelle caractéristique. Par contre le temps caractéristique auquel nous observons (1.1) est imposé par le fait que nous cherchons le régime de diffusion. Par suite, nous choisissons l'échelle beaucoup plus grande

$$t_0 = \frac{1}{\eta^2} t_{V_0} = \frac{R_0}{\eta V_0}. \quad (1.19)$$

Avec ces échelles, nous définissons les variables et les fonctions du problème adimensionné

$$\begin{aligned} \hat{t} &= t_0 t \\ \hat{\tau} &= t_{V_0} \tau \\ \hat{E}(\hat{z}) &= E_0 E(z) \vec{e}_z \\ \hat{v} &= V_0 v \text{ où } v = (v_r, v_\theta, v_z), \\ \hat{B}(\hat{r}, \hat{z}) &= B_0 B_\eta(r, z). \end{aligned}$$

Le champ magnétique $B_\eta(r, z)$ dépend de r (donc de η), ce que nous soulignons par l'indice η .

Importance relative des collisions Il nous reste à situer les échelles des opérateurs de collisions. Nous distinguons les collisions élastiques - qui ne changent pas l'énergie de l'électron incident et qui ne créent ni ne font disparaître d'électrons - et les collisions inélastiques, qui modifient l'énergie et le nombre des électrons.

Pour les collisions aux parois comme pour les collisions en volume, nous postulons que les collisions inélastiques sont peu nombreuses devant les collisions élastiques, ce qui amène les définitions :

$$\begin{aligned}\hat{\gamma}_i^e &= \gamma_i^e = \mathcal{O}(1), \\ \hat{\gamma}_i^a &= \eta^2 \gamma_i^a \text{ où } \gamma_i^a = \mathcal{O}(1), \\ \hat{\mathcal{E}}_i &= \mathcal{E}_i = \mathcal{O}(1), \\ \hat{\mathcal{S}}_i &= \eta^2 \mathcal{S}_i \text{ où } \mathcal{S}_i = \mathcal{O}(1),\end{aligned}$$

pour les collisions aux deux parois ($i = 0$ et $i = 1$), et pour les collisions en volume nous décomposons $\hat{\mathbf{Q}}_{exc}$ et $\hat{\mathbf{Q}}_{ion}$ en collisions élastiques et inélastiques (que nous détaillerons dans la section 1.4) :

$$\hat{\mathbf{Q}}_{exc} = \mathbf{Q}_{exc}^{elas} + \eta^2 \mathbf{Q}_{exc} \text{ où } \mathbf{Q}_{exc} = \mathcal{O}(1) \text{ et } \mathbf{Q}_{exc}^{elas} = \mathcal{O}(1), \quad (1.20)$$

$$\hat{\mathbf{Q}}_{ion} = \mathbf{Q}_{ion}^{elas} + \eta^2 \mathbf{Q}_{ion} \text{ où } \mathbf{Q}_{ion} = \mathcal{O}(1) \text{ et } \mathbf{Q}_{ion}^{elas} = \mathcal{O}(1). \quad (1.21)$$

et nous posons :

$$\begin{aligned}\mathbf{Q}_{exc}^{elas}(\hat{f}) &= - \left(\frac{\hat{f} - [\hat{f}]}{\hat{\tau}_{exc}} \right), \\ \mathbf{Q}_{ion}^{elas}(\hat{f}) &= - \left(\frac{\hat{f} - [\hat{f}]}{\hat{\tau}_{ion}} \right),\end{aligned}$$

de sorte que toutes les collisions élastiques en volume se regroupent sous la forme

$$\mathbf{Q}_{total}^{elas}(\hat{f}) = - \left(\frac{\hat{f} - [\hat{f}]}{\hat{\tau}} \right),$$

où $\hat{\tau}$ est le temps de relaxation total donné par

$$\frac{1}{\hat{\tau}} = \frac{1}{\hat{\tau}_{elas}} + \frac{1}{\hat{\tau}_{exc}} + \frac{1}{\hat{\tau}_{ion}}.$$

Nous expliciterons le calcul des temps de relaxation dans la section 1.4.

Dans les variables adimensionnées, nous obtenons le problème d'inconnue $f = f(x, v, t)$ la fonction de distribution des électrons, qui dépend du vecteur position $x = (r, z) \in \Omega = [0, 1] \times [0, l]$, du vecteur vitesse $v = (v_r, v_\theta, v_z) \in \mathbb{R}^3$, et du temps t . Le problème s'écrit :

$$\left\{ \begin{array}{l} \eta^2 \frac{\partial f}{\partial t} + \eta \left(v_z \frac{\partial f}{\partial z} - E_z(z) \frac{\partial f}{\partial v_z} + \frac{v_\theta^2}{\rho_\eta(r)} \frac{\partial f}{\partial v_r} - \frac{v_r v_\theta}{\rho_\eta(r)} \frac{\partial f}{\partial v_\theta} \right) \\ \quad + v_r \frac{\partial f}{\partial r} + B_\eta(r, z) \left(v_\theta \frac{\partial f}{\partial v_z} - v_z \frac{\partial f}{\partial v_\theta} \right) + \left(\frac{f - [f]}{\tau} \right) = \eta^2 (\mathbf{Q}_{exc}(f) + \mathbf{Q}_{ion}(f)) \\ \\ f_i^-(v) = (1 - \gamma_i^e) f_i^+(v_*) + \gamma_i^e \mathcal{E}_i f_i^+(v) \\ \quad + \eta^2 [\mathcal{S}_i f_i^+ - \gamma_i^a f_i^+(v_*)], \quad \forall v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0, \end{array} \right. \quad (1.22)$$

avec $\sigma_0 = -1$ et $\sigma_1 = +1$ et $\rho_\eta(r) = 1 + \eta r$.

Développement de Hilbert Par souci de simplifier la lecture, nous définissons les opérateurs sur les valeurs aux bords, pour $\sigma_i v_r < 0$:

$$\begin{aligned}\mathcal{F}_i f_i^+(v) &= (1 - \gamma_i^e) f_i^+(v_*) + \gamma_i^e \mathcal{E}_i f_i^+ \\ \mathcal{B}_i f &= f_i^-(v) - \mathcal{F}_i f_i^+(v).\end{aligned}\quad (1.23)$$

ainsi que

$$\mathcal{A}f = v_r \frac{\partial f}{\partial r} + B^\eta(r, z) \left(v_\theta \frac{\partial f}{\partial v_z} - v_z \frac{\partial f}{\partial v_\theta} \right) + \left(\frac{f - [f]}{\tau} \right) \quad (1.24)$$

$$\mathcal{C}f = v_z \frac{\partial f}{\partial z} - E_z(z) \frac{\partial f}{\partial v_z} + \frac{v_\theta^2}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial f}{\partial v_r} - \frac{v_r v_\theta}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial f}{\partial v_\theta} \quad (1.25)$$

Ces notations permettent de réécrire (1.22) en :

$$\begin{cases} \eta^2 \frac{\partial f}{\partial t} + \eta \mathcal{C}f + \mathcal{A}f = \eta^2 (\mathbf{Q}_{exc}(f) + \mathbf{Q}_{ion}(f)) \\ \mathcal{B}_i f_i(v) = \eta^2 [\mathcal{S}_i f_i^+ - \gamma_i^a f_i^+(v_*)], \quad \forall (v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0), i = 0, 1 \end{cases} \quad (1.26)$$

L'analyse asymptotique de (1.26) repose sur le développement de Hilbert de f :

$$f = f_0 + \eta f_1 + \eta^2 f_2 + \dots \quad (1.27)$$

et notre objectif est de calculer f_0 . De plus, il convient de développer le facteur géométrique :

$$\begin{aligned}\frac{1}{\rho^\eta(r)} &= \frac{1}{1 + \eta r} \\ &= 1 - \eta r + \eta^2 r^2 + \dots,\end{aligned}$$

ce qui revient à supposer que la géométrie est proche d'une géométrie planaire. De ce développement nous ne conservons que l'ordre dominant, c'est-à-dire $\frac{1}{\rho^\eta(r)} \approx 1$. Ceci nous invite à définir l'opérateur

$$\mathcal{C}_2 f = v_z \frac{\partial f}{\partial z} - E_z(z) \frac{\partial f}{\partial v_z} + v_\theta^2 \frac{\partial f}{\partial v_r} - v_r v_\theta \frac{\partial f}{\partial v_\theta} \quad (1.28)$$

Dans (1.26) nous remplaçons f par son développement (1.27), et nous identifions les termes en facteur des mêmes puissances de η . Avec les trois premières puissances de η , nous obtenons les problèmes suivants, où i prend les valeurs 0 et 1 pour les parois internes et externes :

(i) ordre η^0 :

$$\mathcal{A}f_0(x, v) = 0, \quad (x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3, \quad (1.29)$$

$$\mathcal{B}_i f_0(z, v) = 0, \quad z \in \mathbb{R}, \quad v \in \mathbb{R}^3, \quad \sigma_i v_r < 0, \quad (1.30)$$

(ii) ordre η^1 :

$$\mathcal{A} f_1(x, v) = -\mathcal{C}_2 f_0, \quad (x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3, \quad (1.31)$$

$$\mathcal{B}_i f_1(z, v) = 0, \quad z \in \mathbb{R}, \quad v \in \mathbb{R}^3, \quad \sigma_i v_r < 0, \quad (1.32)$$

(iii) ordre η^2 :

$$\mathcal{A} f_2(x, v) = -\mathcal{C}_2 f_1 - \frac{\partial}{\partial t} f_0, \quad (x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3, \quad (1.33)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_i f_2(z, v) &= \mathcal{S}_i(f_0)_i^+ - \gamma_i^a(f_0)_i^+(v_*) \\ &\quad + \mathbf{Q}_{exc}(f_0) + \mathbf{Q}_{ion}(f_0), \quad z \in \mathbb{R}, \quad v \in \mathbb{R}^3, \quad \sigma_i v_r < 0, \end{aligned} \quad (1.34)$$

Condition de solvabilité, résolution

Ces trois problèmes ont la forme :

$$\mathcal{A} f(x, v) = g, \quad (x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3, \quad (1.35)$$

$$\mathcal{B}_i f(z, v) = h_i, \quad z \in \mathbb{R}, \quad v \in \mathbb{R}^3, \quad \sigma_i v_r < 0, \quad i = 0, 1, \quad (1.36)$$

et l'étude de ce problème général [15] apporte les propriétés de la solution du problème homogène d'une part, et une condition sur g et h_i pour qu'une solution existe. Nous citons le théorème suivant, en notant $u = |v|$:

Théorème 1 [15, 18, 19]

(i) Soient $g = 0, h_i = 0, i = 0, 1$.

L'ensemble des solutions de (1.35, 1.36) (dans $L^\infty([0, 1]_u, L^1([0, 1]_r \times \mathbb{S}^2_\omega))$ par exemple) est formé des fonctions qui ne dépendent que de u (i.e. indépendantes de r et ω).

(ii) Soient $g \neq 0, h_i \neq 0, i = 0, 1$.

La condition nécessaire et suffisante pour que le problème (1.35, 1.36) admette une solution (dans $L^\infty([0, 1]_u, L^1([0, 1]_r \times \mathbb{S}^2_\omega))$ par exemple) est :

$$\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} g(r, u\omega) dr d\omega + u \sum_{i=0,1} \int_{\omega \in \mathbb{S}^2} h_i(u\omega) |\omega_r| d\omega = 0, \quad \forall u > 0 \quad (1.37)$$

De plus, la solution f est unique si elle vérifie la condition supplémentaire :

$$\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} f(r, u\omega) dr d\omega = 0, \quad \forall u > 0 \quad (1.38)$$

Appliquons ces résultats à la résolution des problèmes (1.29, 1.30), (1.31, 1.32), et (1.33, 1.34).

Problème (1.29), (1.30) Soit $f_0(x, v, t)$ la solution de ce problème homogène et $\tilde{f}_0 = \tilde{f}_0(z, r, u, \omega, t)$ son expression lorsque la vitesse est exprimée en coordonnées sphériques. Le théorème 1 indique que $u \mapsto \tilde{f}_0(z, r, u, \omega, t)$ ne dépend pas de r et ω , donc la solution f_0 s'écrit :

$$f_0(x, v, t) = L(z, u, t), \quad (1.39)$$

où $L(z, u, t)$ est arbitraire à ce stade.

Problème (1.31), (1.32) Pour ce second problème, le second membre n'est pas nul et il faut vérifier qu'il satisfait la condition (1.37), qui s'écrit ici :

$$\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} -\mathcal{C}_2 f_0(r, u\omega) dr d\omega = 0. \quad (1.40)$$

Nous rappelons que \mathcal{C}_2 est défini en (1.28). Afin de calculer $\mathcal{C} f_0$, nous rappelons la définition des coordonnées sphériques du vecteur vitesse :

$$\begin{cases} u &= \sqrt{v_r^2 + v_\theta^2 + v_z^2} \\ \omega_j &= \frac{v_j}{u}, \quad \text{pour } j = r, \theta, z \end{cases} \quad (1.41)$$

Nous choisissons de paramétriser la sphère \mathbb{S}^2 par les directions $(\omega_\theta, \omega_z)$, ω_r étant défini par $\omega_r = \sigma_r \sqrt{1 - \omega_\theta^2 - \omega_z^2}$ et $\sigma_r = \pm 1$. Ainsi, la sphère \mathbb{S}^2 est décrite par les deux cartes locales $\{(\sigma_r, \omega_\theta, \omega_z), \sigma_r = \pm 1\}$. Prouvons le

Lemme 1 Soit le changement en coordonnées sphériques :

$$(v_r, v_\theta, v_z) \mapsto (u, \omega_r, \omega_\theta, \omega_z),$$

avec

$$\begin{cases} u &= \sqrt{v_r^2 + v_\theta^2 + v_z^2} \\ \omega_r &= \text{sgn}(v_r) \sqrt{1 - \omega_\theta^2 - \omega_z^2} \\ \omega_\theta &= \frac{v_\theta}{u} \\ \omega_z &= \frac{v_z}{u} \end{cases}$$

Alors pour $\text{sgn}(v_r) = \pm 1$ on a :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial v_r} &= \frac{\partial f}{\partial u} \cdot \omega_r - \frac{\partial f}{\partial \omega_\theta} \cdot \frac{\omega_r \omega_\theta}{u} - \frac{\partial f}{\partial \omega_z} \cdot \frac{\omega_r \omega_z}{u} \\ \frac{\partial f}{\partial v_\theta} &= \frac{\partial f}{\partial u} \cdot \omega_\theta + \frac{\partial f}{\partial \omega_\theta} \cdot \frac{1 - \omega_\theta^2}{u} - \frac{\partial f}{\partial \omega_z} \cdot \frac{\omega_\theta \omega_z}{u} \\ \frac{\partial f}{\partial v_z} &= \frac{\partial f}{\partial u} \cdot \omega_z - \frac{\partial f}{\partial \omega_\theta} \cdot \frac{\omega_\theta \omega_z}{u} + \frac{\partial f}{\partial \omega_z} \cdot \frac{1 - \omega_z^2}{u} \end{aligned} \quad (1.42)$$

Preuve : Pour $\text{sgn}(v_r) = \pm 1$, on a la dérivation d'une fonction composée :

$$\frac{\partial f}{\partial v_j} = \frac{\partial f}{\partial u} \frac{\partial u}{\partial v_j} + \frac{\partial f}{\partial \omega_\theta} \frac{\partial \omega_\theta}{\partial v_j} + \frac{\partial f}{\partial \omega_z} \frac{\partial \omega_z}{\partial v_j},$$

Pour chacune des coordonnées :

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial v_j} &= \frac{v_j}{\sqrt{v_r^2 + v_\theta^2 + v_z^2}} \\ &= \omega_j, \end{aligned}$$

De plus, le calcul montre, en se souvenant que $v_j = u\omega_j$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \omega_\theta}{\partial v_\theta} &= \frac{1 - \omega_\theta^2}{u} \\ \frac{\partial \omega_z}{\partial v_\theta} &= -\frac{\omega_\theta \omega_z}{u} \end{aligned}$$

ainsi que :

$$\begin{aligned}\frac{\partial \omega_\theta}{\partial v_z} &= -\frac{\omega_\theta \omega_z}{u} \\ \frac{\partial \omega_z}{\partial v_z} &= \frac{1 - \omega_z^2}{u}\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\frac{\partial \omega_\theta}{\partial v_r} &= -\frac{\omega_\theta \omega_r}{u} \\ \frac{\partial \omega_z}{\partial v_r} &= -\frac{\omega_z \omega_r}{u}.\end{aligned}$$

ce qui prouve le résultat du lemme.

Si on considère des fonctions qui ne dépendent pas de ω (comme c'est le cas pour f_0) alors, en utilisant le lemme que nous venons de démontrer :

$$\frac{\partial f}{\partial v_j} = \frac{\partial f}{\partial u} \omega_j. \quad (1.43)$$

En utilisant ces résultats et en substituant $v_j = u \omega_j$, $-\mathcal{C}_2 f_0$ prend la forme plus simple :

$$-\mathcal{C}_2 f_0 = -\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u}\right) f_0 \cdot \omega_z. \quad (1.44)$$

Cette expression nous permet de constater que $\mathcal{C}_2 f_0$ est une fonction impaire de ω_z . En effet, $\omega_z \mapsto u$ est paire, et $\mathcal{C}_2 f_0$ est donc le produit d'une fonction paire (par rapport à ω_z) et de ω_z , qui est impaire. En conséquence, *la condition de solvabilité pour (1.31, 1.32) est toujours satisfaite*, car :

$$\int_{-1}^1 -\mathcal{C}_2 f_0 (r, u\omega) d\omega_z = 0, \quad (1.45)$$

et par suite

$$\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} -\mathcal{C}_2 f_0 (r, u\omega) d\omega dr = 0. \quad (1.46)$$

L'existence de la solution f_1 au problème (1.31, 1.32) est donc garantie. Pour la calculer, nous remarquons que pour tout couple φ, g tel que φ ne dépend que de u , on a :

$$\begin{aligned}\mathcal{A}(\varphi g) &= \varphi \mathcal{A}g \\ \mathcal{B}_i(\varphi g) &= \varphi \mathcal{B}_i g\end{aligned}$$

Ainsi, par unicité, la solution du problème (1.35, 1.36) avec pour seconds membres $(\varphi g, \varphi h_i)$ est égale à φf où f est solution du problème (1.35, 1.36) avec seconds

membres (g, h_i) . Remarquons finalement que $-(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u}) L$ ne dépend que de u . Ainsi, si nous connaissons la solution du problème :

$$\mathcal{A} D^B(x, v) = \omega_z, \quad (x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3, \quad (1.47)$$

$$\mathcal{B}_i D^B(z, v) = 0, \quad z \in \mathbb{R}, \quad v \in \mathbb{R}^3, \quad \sigma_i v_r < 0, \quad (1.48)$$

alors la solution de (1.31, 1.32) s'écrit, avec $f_0(x, v, t) = L(z, u, t)$:

$$f_1(z, u, t; r, \omega) = - \left(\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L(z, u, t) \right) D^B(r, \omega; z, u, t) \quad (1.49)$$

$$+ L_1(z, u, t) \quad (1.50)$$

Nous remarquons que la solution de (1.47, 1.48) existe car les seconds membres satisfont de façon évidente la condition de solvabilité. Le calcul de D^B est possible sous certaines conditions sur les réflexions aux parois. Il est reporté à la section 1.5, où nous aurons besoin de l'expliciter.

Problème (1.33), (1.34) La vérification de la condition de solvabilité est cette fois beaucoup plus lourde. Elle n'est pas satisfait sans condition, et cette condition est une équation de diffusion sur $N(z, \varepsilon, t) = L(z, u, t)$, avec $\varepsilon = u^2/2$. L'objet de ce paragraphe est de prouver le

Théorème 2 [15, 18, 19] Pour que le problème (1.33), (1.34) admette une solution $f_2(x, v, t)$, il faut et il suffit que la fonction $N(z, \varepsilon, t)$ définie par

$$N(z, \varepsilon, t) = L(z, u, t), \quad \varepsilon = \frac{u^2}{2}$$

soit solution de

$$\sqrt{2\varepsilon} \frac{\partial N}{\partial t} - \left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) \left[\mathbb{D} \left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N \right] = \mathbb{Q}(N). \quad (1.51)$$

avec

$$\mathbb{D} = \frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{4\pi} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} D \omega_z dr d\omega \quad (1.52)$$

et

$$\begin{aligned} \mathbb{Q}(N)(z, \varepsilon, t) = & \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} \sum_{i=0,1} \left[\int_{(\omega \in \mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r < 0)} \mathcal{S}_i(N)(\sqrt{2\varepsilon}\omega) |\omega_r| d\omega \right. \\ & \left. - \int_{(\omega \in \mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r < 0)} \gamma_i^a(\sqrt{2\varepsilon}\omega) N(\varepsilon) |\omega_r| d\omega \right] \end{aligned} \quad (1.53)$$

$$+ \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \mathbf{Q}_{exc}(N) + \mathbf{Q}_{ion}(N) dr d\omega \quad (1.54)$$

Démonstration Ecrivons la condition de solvabilité en reprenant les seconds membres de (1.33, 1.34) :

$$\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \left(+\mathcal{C}_2 f_1 + \frac{\partial}{\partial t} f_0 \right) dr d\omega = Q_1(f_0), \quad (1.55)$$

avec

$$Q_1(f_0) = u \sum_{i=0,1} \int_{\sigma_i \omega_r < 0} h_i(u\omega) |\omega_r| d\omega, \quad (1.56)$$

et h_i définis en (1.34). Nous avons donc d'ores et déjà le second membre annoncé. Il sera explicité dans les sections 1.3.4 et 1.4.

De plus, nous pouvons facilement calculer

$$\begin{aligned} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \left(\frac{\partial}{\partial t} f_0 \right) dr d\omega &= \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \left(\frac{\partial}{\partial t} L(z, u, t) \right) dr d\omega \\ &= 4\pi \frac{\partial}{\partial t} L(z, u, t). \end{aligned}$$

Attachons nous désormais à calculer $\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \mathcal{C}_2 f_1 dr d\omega$. Prouvons le

Lemme 2 Soient l'opérateur \mathcal{C}_2 défini par (1.28) et la fonction f_1 définie par (1.49). Alors :

$$\begin{aligned} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \mathcal{C}_2(-f_1) dr d\omega &= \left(\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) \left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L \right) \cdot \mathcal{D} \\ &+ \left(\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L \right) \cdot \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \mathcal{C}_2 D^B dr d\omega, \end{aligned}$$

avec

$$\mathcal{D} = \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \omega_z D^B dr d\omega,$$

Preuve : En reprenant (1.49) :

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_2 \left(\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L(z, u, t) \cdot D^B \right) &= \mathcal{C}_2 \left(\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L \right) \cdot D^B \\ &+ \left(\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L \right) \cdot \mathcal{C}_2 D^B, \end{aligned}$$

et en se souvenant que pour une fonction qui ne dépend pas de ω on a $\mathcal{C}_2 K(z, u, t) = \left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) K(z, u, t) \cdot \omega_z$:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_2(-f_1) &= \left(\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) \left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L \right) \cdot \omega_z D^B \\ &+ \left(\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L \right) \cdot \mathcal{C}_2 D^B, \end{aligned}$$

et puisque $L(z, u, t)$ ne dépend ni de r ni de ω , le lemme en découle en posant :

$$\mathcal{D} = \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \omega_z D^B dr d\omega, \quad (1.57)$$

que nous calculerons explicitement dans la section 1.5.

Prouvons à présent le

Lemme 3 *Soient l'opérateur \mathcal{C}_2 défini par (1.28), la fonction D^B définie par (1.47) et (1.48), et la fonction \mathcal{D} définie par (1.57). Alors :*

$$\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \mathcal{C}_2 D^B dr d\omega = u \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial z} - E(z) \left(\left(\frac{2}{u} + \frac{\partial}{\partial u} \right) \mathcal{D} \right).$$

Preuve : En utilisant le lemme 1, l'action de \mathcal{C}_2 sur une fonction de u et ω s'écrit, après simplification :

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_2 D^B &= u \omega_z \frac{\partial D^B}{\partial z} \\ &- E(z) \left[\omega_z \frac{\partial D^B}{\partial u} + \frac{1}{u} \left(-\omega_\theta \omega_z \frac{\partial D^B}{\partial \omega_\theta} + (1 - \omega_z^2) \frac{\partial D^B}{\partial \omega_z} \right) \right] \\ &- u \omega_\theta \omega_r \frac{\partial D^B}{\partial \omega_\theta} \end{aligned}$$

Afin de répartir le calcul, définissons K_1, K_2 et K_3 tels que $K_1 + K_2 + K_3 = \mathcal{C}_2 D^B$:

$$K_1 = u \omega_z \frac{\partial D^B}{\partial z} \quad (1.58)$$

$$K_2 = -E(z) \left[\omega_z \frac{\partial D^B}{\partial u} + \frac{1}{u} \left(-\omega_\theta \omega_z \frac{\partial D^B}{\partial \omega_\theta} + (1 - \omega_z^2) \frac{\partial D^B}{\partial \omega_z} \right) \right] \quad (1.59)$$

$$K_3 = u \omega_\theta \left(-\omega_\theta \frac{\partial D^B}{\partial \omega_r} + \omega_r \frac{\partial D^B}{\partial \omega_\theta} \right). \quad (1.60)$$

On a aisément

$$\begin{aligned} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} K_1 dr d\omega &= u \frac{\partial}{\partial z} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \omega_z D^B dr d\omega \\ &= u \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial z} \end{aligned} \quad (1.61)$$

d'après la définition (1.57).

Dans les cartes locales $(sgn(\omega_r), \omega_\theta, \omega_z)$ de \mathbb{S}^2 , l'intégration sur \mathbb{S}^2 s'écrit :

$$\int_{\mathbb{S}^2} f(\omega) d\omega = \sum_{\tau_r=\pm 1} \int_{\mathbb{S}^2, sgn(\omega_r)=\tau_r} f(\omega) \frac{d\omega_\theta d\omega_z}{|\omega_r|}.$$

Aussi, puisque les sections $\omega_z = a \in]-1, 1[$ de \mathbb{S}^2 sont des courbes fermées, on a, pour des fonctions réelles f et g :

$$\int_{\mathbb{S}^2} \frac{\partial f}{\partial \omega_\theta}(\omega) g(\omega) dw = - \int_{\mathbb{S}^2} f(\omega) \left(|\omega_r| \frac{\partial}{\partial \omega_\theta} \left(\frac{g}{|\omega_r|} \right) \right) dw$$

et de même :

$$\int_{\mathbb{S}^2} \frac{\partial f}{\partial \omega_z}(\omega) g(\omega) dw = - \int_{\mathbb{S}^2} f(\omega) \left(|\omega_r| \frac{\partial}{\partial \omega_z} \left(\frac{g}{|\omega_r|} \right) \right) dw$$

Ces formules nous permettent de nous passer des dérivées de D^B par rapport aux ω_j . En effet, en reprenant K_2 :

$$\int_{\mathbb{S}^2} -\omega_\theta \omega_z \frac{\partial D^B}{\partial \omega_\theta} + (1 - \omega_z^2) \frac{\partial D^B}{\partial \omega_z} d\omega = - \int_{\mathbb{S}^2} D^B A(\omega) d\omega$$

avec

$$A(\omega) = |\omega_r| \frac{\partial}{\partial \omega_\theta} \left(\frac{-\omega_\theta \omega_z}{|\omega_r|} \right) + |\omega_r| \frac{\partial}{\partial \omega_z} \left(\frac{1 - \omega_z^2}{|\omega_r|} \right)$$

En se souvenant de $|\omega_r| = \sqrt{1 - \omega_\theta^2 - \omega_z^2}$, le calcul montre que :

$$A(\omega) = -2 \omega_z$$

d'où :

$$\begin{aligned} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{u} \left(-\omega_\theta \omega_z \frac{\partial D^B}{\partial \omega_\theta} + (1 - \omega_z^2) \frac{\partial D^B}{\partial \omega_z} \right) d\omega dr &= - \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \frac{1}{u} D^B A(\omega) d\omega dr \\ &= \frac{2}{u} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \omega_z D^B d\omega dr \\ &= \frac{2}{u} \mathcal{D}, \end{aligned}$$

toujours d'après (1.57), ce qui donne finalement pour K_2 :

$$\begin{aligned} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} K_2 d\omega dr &= -E(z) \left(\frac{2}{u} \mathcal{D} + \frac{\partial}{\partial u} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \omega_z D^B d\omega dr \right) \\ &= -E(z) \left(\left(\frac{2}{u} + \frac{\partial}{\partial u} \right) \mathcal{D} \right). \end{aligned} \tag{1.62}$$

Enfin, puisque $\frac{\omega_r}{|\omega_r|} = \text{sgn}(\omega_r)$ ne dépend pas de ω_θ , alors :

$$|\omega_r| \frac{\partial}{\partial \omega_\theta} \left(\frac{\omega_r \omega_\theta}{|\omega_r|} \right) = \omega_r$$

et ainsi :

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{S}^2} K_3 d\omega &= \int_{\mathbb{S}^2} -u\omega_\theta\omega_r \frac{\partial D^B}{\partial\omega_\theta} d\omega \\ &= u \int_{\mathbb{S}^2} +D^B |\omega_r| \frac{\partial}{\partial\omega_\theta} \left(\frac{\omega_r\omega_\theta}{|\omega_r|} \right) d\omega \\ &= u \int_{\mathbb{S}^2} D^B \omega_r d\omega.\end{aligned}$$

Nous attirons l'attention du lecteur sur le fait que cette quantité est différente de \mathcal{D} car l'intégration se fait contre ω_r . Montrons que $(\forall r \in [0, 1]) \int_{\mathbb{S}^2} D^B \omega_r d\omega = 0$. Pour cela, on utilise la forme équivalente à (1.24) :

$$\mathcal{A}D^B = u\omega_r \frac{\partial D^B}{\partial r} + B^\eta(r, z) \frac{\partial D^B}{\partial\omega} (e_r \times \omega) + \left(\frac{f - [f]}{\tau} \right).$$

En intégrant la relation $\mathcal{A}D^B = \omega_z$ par rapport à ω , nous obtenons :

$$\begin{aligned}u \frac{\partial}{\partial r} \int_{\mathbb{S}^2} \omega_r D^B d\omega &= \int_{\mathbb{S}^2} \omega_z d\omega \\ &- B^\eta(r, z) \int_{\mathbb{S}^2} \frac{\partial D^B}{\partial\omega} (e_r \times \omega) d\omega \\ &- \int_{\mathbb{S}^2} \left(\frac{f - [f]}{\tau} \right) d\omega.\end{aligned}$$

Or par imparité, $\int_{\mathbb{S}^2} \omega_z d\omega = 0$, et en rappelant la définition $[f] = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} f(|v|\omega) d\omega$ on a aussi $\int_{\mathbb{S}^2} \left(\frac{f - [f]}{\tau} \right) d\omega = 0$. De plus, par la formule de Green,

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{S}^2} \frac{\partial D^B}{\partial\omega} (e_r \times \omega) d\omega &= - \int_{\mathbb{S}^2} D^B \operatorname{div}_{\mathbb{S}^2} (e_r \times \omega) d\omega \\ &= 0\end{aligned}$$

car le calcul montre que $\operatorname{div}_{\mathbb{S}^2} (e_r \times \omega) = 0$. Ainsi nous avons :

$$\frac{\partial}{\partial r} \int_{\mathbb{S}^2} \omega_r D^B d\omega = 0, \quad (\forall r \in [0, 1]). \quad (1.63)$$

Or la condition de réflexion au bord $\mathcal{B}_0 D^B = 0$ définie en (1.23) et l'hypothèse 1 prouvent que

$$\left(\int_{\mathbb{S}^2} \omega_r D^B d\omega \right)_{r=0} = 0. \quad (1.64)$$

En effet :

$$\int_{\mathbb{S}^2} \omega_r D^B d\omega = \int_{\{\mathbb{S}^2, \omega_r > 0\}} |\omega_r| D^B d\omega - \int_{\{\mathbb{S}^2, \omega_r < 0\}} |\omega_r| D^B d\omega,$$

et la condition $\mathcal{B}_0 D^B = 0$ s'écrit sous une forme condensée :

$$(\forall \omega_r > 0) D^B(\omega_r) = (1 - \gamma_0^e) D^B(-\omega_r) + \gamma_0^e \int_{\{\mathbb{S}^2, \omega'_r < 0\}} K_0(\omega' \rightarrow \omega) D^B(\omega'_r) d\omega',$$

En permutant les intégrations et en utilisant l'hypothèse 1, on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{\{\mathbb{S}^2, \omega_r > 0\}} |\omega_r| D^B d\omega &= (1 - \gamma_0^e) \int_{\{\mathbb{S}^2, \omega_r > 0\}} |\omega_r| D^B(-\omega_r) d\omega \\ &+ \gamma_0^e \int_{\{\mathbb{S}^2, \omega'_r < 0\}} |\omega'_r| D^B(\omega'_r) d\omega' \\ &= \int_{\{\mathbb{S}^2, \omega'_r < 0\}} |\omega'_r| D^B(\omega'_r) d\omega', \end{aligned}$$

d'où (1.64) et ainsi, d'après (1.63) :

$$(\forall r \in [0, 1]) \int_{\mathbb{S}^2} D^B \omega_r d\omega = 0,$$

d'où

$$\int_{\mathbb{S}^2} K_3 d\omega = 0. \quad (1.65)$$

En regroupant (1.61), (1.62), (1.65), le lemme en découle.

Finalement, nous prouvons le

Lemme 4 Soient l'opérateur \mathcal{C}_2 défini par (1.28), et les fonctions f_1 définie par (1.49) et \mathcal{D} définie par (1.57). Alors :

$$\begin{aligned} \sqrt{2\varepsilon} \int_0^1 \int_{S^2} \mathcal{C}_2 f_1 dr d\omega &= -\tilde{\nabla} \left((2\varepsilon)^{3/2} \mathcal{D} \tilde{\nabla} N(z, \varepsilon, t) \right) \\ &= -4\pi \tilde{\nabla} \left(\mathbb{D} \tilde{\nabla} N(z, \varepsilon, t) \right), \end{aligned} \quad (1.66)$$

avec

$$\mathbb{D} = \frac{(2\varepsilon)^{3/2}}{4\pi} \int_0^1 \int_{S^2} \omega_z D^B dr d\omega, \quad (1.67)$$

et la notation $\tilde{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right)$.

Preuve : En effectuant le changement de variables $u = \sqrt{2\varepsilon}$, $N(z, \varepsilon, t) = L(z, u, t)$, (1.57) devient :

$$\begin{aligned} \int_0^1 \int_{S^2} \mathcal{C}_2 f_1 dr d\omega &= - \left(\sqrt{2\varepsilon} \tilde{\nabla} \left(\sqrt{2\varepsilon} \tilde{\nabla} N \right) \right) \mathcal{D} \\ &+ E(z) \left(\sqrt{2\varepsilon} \tilde{\nabla} N \right) \left(\frac{2}{\sqrt{2\varepsilon}} + \sqrt{2\varepsilon} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) \mathcal{D} \\ &- \left(\sqrt{2\varepsilon} \tilde{\nabla} N \right) \sqrt{2\varepsilon} \frac{\partial \mathcal{D}}{\partial z} \end{aligned} \quad (1.68)$$

en notant $\tilde{\nabla} = \left(\frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right)$. Finalement, en multipliant par $\sqrt{2\varepsilon}$ et en regroupant les termes², nous obtenons le résultat annoncé par le lemme.

Modèle de diffusion En utilisant les résultats du paragraphe précédent, le terme de gauche de la condition de solvabilité s'écrit sous la forme :

$$\sqrt{2\varepsilon} \int_0^1 \int_{S^2} \left(+C_2 f_1 + \frac{\partial}{\partial t} f_0 \right) dr d\omega = 4\pi \tilde{\nabla} \left(\mathbb{D} \tilde{\nabla} N(z, \varepsilon, t) \right) + 4\pi \sqrt{2\varepsilon} \frac{\partial N}{\partial t},$$

ce qui en définitive prouve le théorème 2, en divisant par 4π .

L'équation (1.51) peut être vue comme une équation de diffusion où $\mathbb{D}(z, \varepsilon, t)$ est le coefficient de diffusion. L'examen des calculs que nous avons mené pour y aboutir montre qu'il prend en compte les phénomènes élastiques. Il sera calculé analytiquement dans la section 1.5. Enfin, $Q(N)(z, \varepsilon, t)$ est ici un opérateur de collision, et on constate qu'il regroupe l'influence des phénomènes inélastiques aux parois et en volume.

Comme $f_0(x, v, t)$ est une approximation de $f(x, v, t)$, et d'après les définitions $f_0(x, v, t) = L(z, u, t) = N(z, \varepsilon, t)$, une approximation du nombre de particules situées dans $[z, z + dz]$ et ayant une énergie dans $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$ est :

$$dN = N(z, \varepsilon, t) 4\pi \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon dz.$$

Nous constatons donc que $N(z, \varepsilon, t)$ peut être vue comme la *fonction de distribution en énergie* des électrons dépendant de la variable axiale z . Cette fonction nous servira donc pour calculer des grandeurs moyennes telles que l'énergie moyenne, ou des fréquences de collisions moyennes dans le chapitre 3.

Modèle stationnaire

A des fins pratiques, l'équation (1.51) peut être simplifiée. Le potentiel électrique $\phi(z)$ est défini par $E(z) = \frac{\partial \phi}{\partial z}(z)$. Définissons l'énergie totale $W = \varepsilon - \phi$, qui est constante pour un électron qui remonte le potentiel en l'absence de collision modifiant son énergie. Avec le changement de variables $\varepsilon(W) = W + \phi$ et $\tilde{N}(z, W, t) = N(z, \varepsilon(W), t)$, l'équation (1.51) devient

$$\sqrt{2(W + \Phi)} \left(\frac{\partial \tilde{N}}{\partial t} - \frac{\partial \Phi}{\partial t} \frac{\partial \tilde{N}}{\partial W} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \mathbb{D}(z, \varepsilon(W), t) \frac{\partial}{\partial z} \tilde{N} = Q(\tilde{N}),$$

et nous résoudrons l'équation stationnaire :

$$-\frac{\partial}{\partial z} \mathbb{D}(z, \varepsilon(W)) \frac{\partial}{\partial z} \tilde{N} = Q(\tilde{N}). \quad (1.69)$$

Les conditions aux limites que nous imposons sont détaillées dans la section 1.6.

²Le développement de (1.66) conduit plus aisément à (1.68)

1.3 Collisions aux parois

L'objet de cette section est de préciser la modélisation des phénomènes aux parois. En particulier nous montrons le lien avec les données physiques et nous donnons les contributions de chacun des phénomènes (réflexions spéculaires et diffusives, attachement, émission secondaire) au modèle (1.51).

1.3.1 Nombre moyen d'électron réémis

Dans ce paragraphe, nous détaillons le lien que nous avons défini entre le nombre moyen d'électrons réémis par une paroi (issu d'expérimentations) et le modèle de réflexion par une paroi (1.10).

Compte tenu des échelles auxquelles se produisent les phénomènes aux parois, il est très délicat de décrire précisément les interactions avec la paroi. Par contre, des résultats expérimentaux existent quant au nombre moyen de particules réémises pour une particule incidente d'énergie donnée. Nous noterons cette fonction $\gamma(\varepsilon)$. La figure 1.4 en donne un exemple, et nous permet de définir les quantités importantes pour la modélisation. Les énergies ε_1 et ε_2 correspondent aux énergies à partir desquelles, *en l'absence de gaine* ($\varepsilon_g = 0$), le nombre moyen d'électrons réémis est plus grand que 1 et 2. La courbe reflète la situation suivante :

- Lorsque l'énergie d'un électron est inférieure au potentiel de gaine, il est réfléchi par la paroi (spécialement). Le nombre d'électrons réémis pour un électron incident d'énergie $\varepsilon < \varepsilon_g$. Dans ce cas $\gamma(\varepsilon)$ est donc égal à 1.
- Lorsque l'énergie d'un électron dépasse ce seuil, il a de fortes chances de rester attaché à la paroi. $\gamma(\varepsilon)$ est alors proche de 0 et augmente lorsque l'énergie de l'électron incident augmente. Pour $\varepsilon_g < \varepsilon < \varepsilon_1 + \varepsilon_g$, on a donc $0 < \gamma(\varepsilon) < 1$, c'est-à-dire qu'en moyenne il repart moins d'électrons qu'il n'en arrive.
- Pour $\varepsilon_1 + \varepsilon_g < \varepsilon < \varepsilon_2 + \varepsilon_g$, on a $1 < \gamma(\varepsilon) < 2$, ce qui signifie qu'il repart plus d'électrons qu'il n'en arrive, grâce à l'émission secondaire.
- Pour $\varepsilon_2 + \varepsilon_g < \varepsilon$, nous avons considéré que $\gamma(\varepsilon) = 2$. L'abandon de cette hypothèse soulèverait les difficultés inhérentes à la modélisation d'émission de plusieurs électrons pour un électron incident, notamment en ce qui concerne la répartition de l'énergie de l'électron incident entre les particules émergentes.

Nous considérons que les propriétés des deux parois sont identiques, et nous omettrons les indices $i = 0, 1$ dès que ce sera possible. Les nombres moyens d'électrons émergeant de la paroi après des réflexions spéculaires, diffusives, ou une émission secondaire sont respectivement notés γ_s , γ_e , et γ_{es} , et le nombre d'électrons attachés est noté γ_a .

Pour les trois gammes d'énergies définies par ε_g et $\varepsilon_1 + \varepsilon_g$, nous avons fait les choix suivants :

$\varepsilon < \varepsilon_g$ Toutes les interactions avec les parois sont des réflexions spéculaires. Aussi nous posons :

$$\gamma_s = 1$$

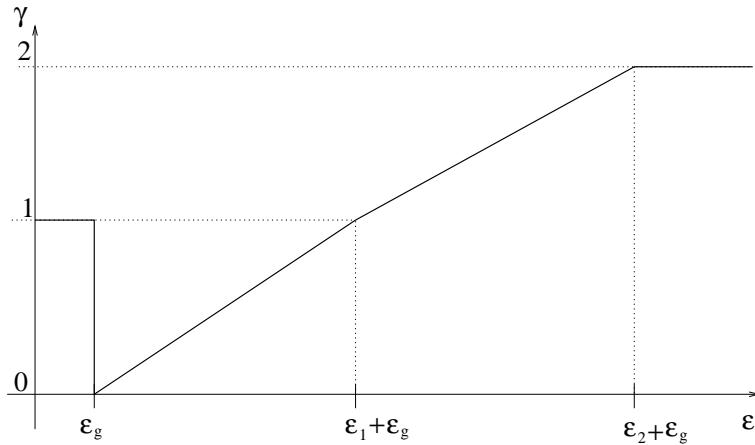


FIG. 1.4 – Nombre moyen d'électrons réémis par la paroi. Dans notre modèle nous avons approximé les données expérimentales par une fonction affi ne par morceaux. ε_g , ε_1 et ε_2 suffi sent à représenter cette fonction.

$$\begin{aligned}\gamma_e &= 0 \\ \gamma_a &= 0 \\ \gamma_{es} &= 0.\end{aligned}$$

$\varepsilon_g < \varepsilon < \varepsilon_1 + \varepsilon_g$ Nous considérons que seuls l'attachement et les réflexions diffusives ont lieu. Le nombre total d'électrons se répartit entre ces deux processus, et les électrons émergents sont ceux qui ont participé à une réflexion diffusive :

$$\begin{aligned}\gamma_s &= 0 \\ \gamma_e &= \gamma(\varepsilon) \\ \gamma_a &= 1 - \gamma(\varepsilon) \\ \gamma_{es} &= 0.\end{aligned}$$

$\varepsilon_1 + \varepsilon_g < \varepsilon$ Similairement, nous considérons que lorsque le nombre d'électrons réémis est plus grand que 1, il n'y a pas d'attachement, et que les électrons réémis viennent soit d'une émission secondaire, soit d'une réflexion diffusive, i.e. $\gamma = \gamma_e + \gamma_{es}$. Ceci nous donnerait, en considérant que tous les électrons sont réfléchis de manière diffusive pour $\varepsilon = \varepsilon_1 + \varepsilon_g$ et tous les électrons viennent d'émission secondaire pour $\varepsilon > \varepsilon_2 + \varepsilon_g$:

$$\begin{aligned}\gamma_s &= 0 \\ \gamma_e &= 2 - \gamma(\varepsilon) \\ \gamma_a &= 0\end{aligned}$$

$$\gamma_{es} = 2(\gamma(\varepsilon) - 1).$$

Toutefois, lorsque l'énergie s'approche de $\varepsilon_2 + \varepsilon_g$, γ_e devient petit et s'annule pour $\varepsilon > \varepsilon_2 + \varepsilon_g$. Or, pour un électron arrivant à la paroi avec une énergie ε , nous avons considéré que la répartition de son énergie entre les deux électrons réémis après émission secondaire est très inégale. En pratique, un électron emporte au plus $\chi = 10\%$ de l'énergie et l'autre emporte au moins $(1 - \chi)\varepsilon$, de sorte que l'on peut estimer que l'électron le plus énergétique participe aussi aux réflexions diffusives. Nous adoptons donc :

$$\begin{aligned}\gamma_s &= 0 \\ \gamma_e &= 1 \\ \gamma_a &= 0 \\ \gamma_{es} &= 2(\gamma(\varepsilon) - 1).\end{aligned}$$

1.3.2 Prise en compte des réflexions spéculaire et diffusive dans le modèle SHE

Les réflexions spéculaires et diffusives interviennent au niveau des opérateurs \mathcal{B}_i définis en (1.23). En reprenant la dérivation du modèle SHE, on se rend compte que ces opérateurs influencent la valeur de $f_1(x, v, t)$, et plus précisément la valeur de la solution D^B au problème (1.47, 1.48). Par suite, c'est dans le calcul du coefficient de diffusion défini par (1.52) que se retrouve cette influence. Nous détaillerons ce calcul dans la section 1.5. L'introduction des données physiques se fait simplement en utilisant les nombres d'électrons réémis par la paroi :

$$\begin{aligned}\gamma_i^e &= \gamma_e \\ \gamma_i^a &= \gamma_a\end{aligned}$$

tel qu'ils sont définis à partir des mesures $\gamma(\varepsilon)$ dans le paragraphe précédent.

1.3.3 Attachement

Prouvons la

Proposition 1 *La contribution de l'attachement au second membre de (1.53), définie par*

$$\mathbb{Q}_a(N) = -\frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} \sum_{i=0,1} u \int_{(\omega \in \mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r < 0)} \gamma_i^a(\sqrt{2\varepsilon}\omega) N(\varepsilon) |\omega_r| d\omega$$

se ramène, dans le cas isotrope et lorsque les deux parois ont des propriétés identiques $\gamma_i^a = \gamma^a$, à :

$$\mathbb{Q}_a(N) = -\varepsilon \gamma^a(\varepsilon) N(\varepsilon).$$

La contribution de l'attachement au second membre de (1.53) vaut :

$$\begin{aligned} \mathbb{Q}_a(N) &= -\frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} \sum_{i=0,1} u \int_{(\omega \in \mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r < 0)} \gamma_i^a(\sqrt{2\varepsilon}\omega) N(\varepsilon) |\omega_r| d\omega \\ &= -\frac{\varepsilon}{2\pi} N(\varepsilon) \sum_{i=0,1} \int_{(\omega \in \mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r < 0)} \gamma_i^a(\sqrt{2\varepsilon}\omega) |\omega_r| d\omega. \end{aligned} \quad (1.70)$$

En considérant que le coefficient d'attachement ne dépend que de l'énergie, et que $\gamma_0^a(\varepsilon) = \gamma_1^a(\varepsilon) = \gamma^a(\varepsilon)$, alors (1.70) devient :

$$\mathbb{Q}_a(N) = -\frac{\varepsilon}{2\pi} N(\varepsilon) \sum_{i=0,1} \gamma_a(\varepsilon) \int_{(\omega \in \mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r < 0)} |\omega_r| d\omega$$

d'où la proposition, en utilisant $\int_{(\omega \in \mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r < 0)} |\omega_r| d\omega = \pi$.

1.3.4 Emission secondaire

Soit :

$$\mathbb{Q}_{es}(N)(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} u \sum_{i=0,1} \int_{(\omega \in \mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r < 0)} \mathcal{S}_i(N)(\sqrt{2\varepsilon}\omega) |\omega_r| d\omega.$$

L'objet de cette section est d'exprimer cet opérateur différemment, de manière à pouvoir faire le lien avec le nombre moyen d'électrons réémis $\gamma(\varepsilon)$.

Réécriture de $\mathbb{Q}_{es}(N)$

L'objet de ce paragraphe est de prouver le

Lemme 5 Soit $\mathbb{Q}_{es}(N)(\varepsilon)$ la contribution de l'émission secondaire au second membre de (1.51), défini par :

$$\mathbb{Q}_{es}(N)(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} u \sum_{i=0,1} \int_{(\omega \in \mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r < 0)} \mathcal{S}_i(N)(\sqrt{2\varepsilon}\omega) |\omega_r| d\omega.$$

Alors l'action de cet opérateur sur $N(z, \varepsilon, t)$ s'écrit aussi :

$$\mathbb{Q}_{es}(N)(\varepsilon) = \int_{\varepsilon' > \varepsilon} \sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) N(\varepsilon', z, t) d\varepsilon'$$

avec

$$\sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) = \frac{\varepsilon \sqrt{2\varepsilon'}}{2\pi} \sum_{i=0,1} \int_{\omega \in \mathbb{S}^2} \int_{\sigma_i \omega_r < 0} \int_{\sigma_i \omega'_r > 0} \mathcal{S}_i(\sqrt{2\varepsilon'} \omega' \mapsto \sqrt{2\varepsilon} \omega) |\omega_r| d\omega d\omega'.$$

Preuve : En remplaçant S_i par sa définition donnée en (1.11) et , puis en permutant les intégrations, et en notant $\varepsilon_v = v^2/2$:

$$\begin{aligned}\mathbb{Q}_{es}(N)(\varepsilon_v) &= \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} \sum_{i=0,1} \int_{(\omega \in \mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r < 0)} \left(\int_{\substack{|v'| > |v| \\ \sigma_i v'_r > 0}} S_i(v' \rightarrow v) N(\varepsilon_{v'}) dv' \right) u |\omega_r| d\omega \\ &= \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} \sum_{i=0,1} \int_{\{|v'| > |v|, \sigma_i v'_r > 0\}} |v'_r| N(\varepsilon_{v'}) \bar{S}_i(v' \rightarrow u) dv'\end{aligned}$$

avec

$$\bar{S}_i(v' \rightarrow u) = \int_{\sigma_i \omega_r < 0} S_i(v' \rightarrow u\omega) \frac{u |\omega_r|}{|v'_r|} d\omega. \quad (1.71)$$

En passant en coordonnées sphériques pour la vitesse $v = u\omega$, sachant que $dv = u^2 du d\omega$, $\mathbb{Q}_{es}(N)$ devient :

$$\begin{aligned}\mathbb{Q}_{es}(N)(\varepsilon_v) &= \\ &\frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} \sum_{i=0,1} \int_{\{u' \in \mathbb{R}^+, u' > u\}} N(u' 2/2) (u')^3 \left(\int_{\{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega'_r > 0\}} \bar{S}_i(u' \omega' \rightarrow u) |\omega'_r| d\omega' \right) du',\end{aligned}$$

et en effectuant le changement de variables $\varepsilon = u^2/2$, on obtient finalement :

$$\begin{aligned}\mathbb{Q}_{es}(N)(\varepsilon_v) &= \\ &\frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} \sum_{i=0,1} \int_{\{\varepsilon' \in \mathbb{R}^+, \varepsilon' > \varepsilon\}} N(2\varepsilon') 2\varepsilon' \left(\int_{\{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega'_r > 0\}} \bar{S}_i(\sqrt{2\varepsilon'} \omega' \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) |\omega'_r| d\omega' \right) d\varepsilon',\end{aligned}$$

ce qui prouve le lemme, en posant :

$$\sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) = \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} 2\varepsilon' \sum_{i=0,1} \left(\int_{\{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega'_r > 0\}} \bar{S}_i(\sqrt{2\varepsilon'} \omega' \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) |\omega'_r| d\omega' \right), \quad (1.72)$$

puis en reportant (1.71) :

$$\begin{aligned}\sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) &= \\ &\frac{\varepsilon' \sqrt{2\varepsilon}}{2\pi} \sum_{i=0,1} \left(\int_{\{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega'_r > 0\}} \left(\int_{\sigma_i \omega_r < 0} S_i(\sqrt{2\varepsilon'} \rightarrow \sqrt{2\varepsilon} \omega) \frac{\sqrt{2\varepsilon} |\omega_r|}{\sqrt{2\varepsilon'} |\omega'_r|} d\omega \right) |\omega'_r| d\omega' \right).\end{aligned} \quad (1.73)$$

Cas isotrope

C'est le cas dans lequel nous nous plaçons pour expliciter le modèle SHE, qui correspond à la situation très générale où la réémission par la paroi ne dépend pas de la direction des électrons émergents. Nous rappelons dans un premier temps quelques généralités sur les flux de particules incidents et émergents d'une paroi, afin de clarifier la dépendance de $S_i(u' \omega' \mapsto u\omega)$ par rapport à u, u', ω, ω' . Puis nous réécrivons (1.73) lorsque S_i modélise une réémission isotrope.

Les flux incident $d\phi^+$ et émergent $d\phi^-$ de particules de vitesse dans un volume dv autour de v s'écrit à partir de la fonction de distribution $f(x, v, t)$:

$$\begin{aligned} d\phi^+ &= |v \cdot n| f^+(v) dv, \\ d\phi^- &= |v \cdot n| f^-(v) dv, \end{aligned}$$

où n désigne la normale à la paroi. Nous nous plaçons dès maintenant dans le cadre où les parois sont les cylindres $r = R_i$, $i = 0, 1$, c'est-à-dire $|v \cdot n| = |v_r|$ lorsque v est exprimé en coordonnées cylindriques $v = (v_r, v_\theta, v_z)$. Les particules incidentes auront des vitesses radiales $\sigma_i v_r > 0$ et les particules émergeant de la paroi auront des vitesses radiales opposées $\sigma_i v_r < 0$. Ainsi, le nombre de particules émergeant de la paroi en un point x au temps t vaut :

$$\gamma_i(x, t) = \int_{\{v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0\}} |v_r| f_i^-(v) dv$$

D'une manière générale [10], un processus de collision avec le bord sera représenté par un opérateur du type :

$$|v_r| f_i^-(v) = \int_{\{v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r > 0\}} H_i(v' \rightarrow v) |v'_r| f_i^+(v') dv', \quad \sigma_i v_r < 0,$$

c'est-à-dire :

$$f_i^-(v) = \int_{\{v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v'_r > 0\}} H_i(v' \rightarrow v) \frac{|v'_r|}{|v_r|} f_i^+(v') dv', \quad \sigma_i v_r < 0,$$

et $H(v' \rightarrow v) dv'$ représente donc le nombre de particules renvoyées dans le volume dv' autour de v' , pour une particule incidente de vitesse v . Pour modéliser les réflexions aux parois, la formule précédente nous invite à définir :

$$S_i(v' \rightarrow v) = H_i(v' \rightarrow v) \frac{|v'_r|}{|v_r|},$$

ce qui amène la définition :

$$\mathcal{S}_i f_i^+(v) = \int_{\{v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v'_r > 0\}} S_i(v' \rightarrow v) f_i^+(v') dv', \quad \sigma_i v_r < 0.$$

A présent, nous postulons que la réémission est isotrope. Ceci signifie que le noyau $H(v' \rightarrow v)$ ne dépend pas de la direction des particules incidentes et émergentes, et est proportionnel au volume de l'espace des positions dans lequel les particules sont réémises, ce qui donne :

$$H_i(v' \rightarrow v) = \tilde{H}_i(u' \rightarrow u) |\omega_r|,$$

d'où

$$S_i(v' \rightarrow v) = \left(\frac{1}{\pi} s_i(u' \rightarrow u) \right) \frac{u'}{u} |\omega'_r|.$$

ce qui nous donne :

$$\begin{aligned}\bar{S}_i(v' \rightarrow u) &= \int_{\sigma_i \omega_r < 0} S_i(v' \rightarrow u\omega) \frac{u|\omega_r|}{u'|\omega'_r|} d\omega \\ &= s_i(u' \rightarrow u)\end{aligned}\quad (1.74)$$

car $\int_{\sigma_i \omega_r < 0} |\omega_r| d\omega = \pi$. Similairement :

$$\begin{aligned}\sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) &= \frac{\varepsilon' \sqrt{2\varepsilon}}{2\pi} \sum_{i=0,1} \left(\int_{\{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega'_r > 0\}} \bar{S}_i(\sqrt{2\varepsilon'} \omega' \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) |\omega'_r| d\omega' \right) \\ &= \frac{\varepsilon' \sqrt{2\varepsilon}}{2} \sum_{i=0,1} s_i(u' \rightarrow u).\end{aligned}$$

Ces relations nous seront utiles pour mener le calcul de $\mathbb{Q}_{es}(N)$ jusqu'à son terme.

Nombre moyen d'électrons réémis par émission secondaire

Rappelons que :

$$\mathcal{S}_i f_+^i(v) = \int_{\substack{|v'| > |v| \\ \sigma_i v'_r > 0}} S_i(v' \rightarrow v) f_+^i(v') dv',$$

et que le flux de particules émises lors d'une émission secondaire en un point x , au temp t et à la paroi i s'écrit :

$$\phi(x, t) = \int_{\{v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0\}} |v_r| \mathcal{S}_i f_i^+(v) dv,$$

soit :

$$\phi(x, t) = \int_{\{v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0\}} |v_r| \left(\int_{\substack{|v'| > |v| \\ \sigma_i v'_r > 0}} S_i(v' \rightarrow v) f_i^+(v') dv' \right) dv,$$

ou encore :

$$\phi(x, t) = \int_{\{v' \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v'_r > 0\}} |v'_r| f_i^+(v') \left(\int_{\substack{|v| < |v'| \\ \sigma_i v_r < 0}} S_i(v' \rightarrow v) \frac{|v_r|}{|v'_r|} dv \right) dv',$$

ce qui nous amène à défi nir :

$$\gamma_i^{es}(v') = \int_{\substack{|v| < |v'| \\ \sigma_i v_r < 0}} S_i(v' \rightarrow v) \frac{|v_r|}{|v'_r|} dv \quad (1.75)$$

qui s'interprète comme le nombre d'électrons réémis par émission secondaire à la paroi i , pour un électron incident de vitesse v' . Compte tenu de (1.71), cette quantité s'écrit aussi, en notant $u = |v|$, et $\varepsilon = u^2/2$:

$$\begin{aligned}\gamma_i^{es}(v') &= \int_{u < u'} \left(\int_{\sigma_i \omega_r < 0} S_i(v' \rightarrow u\omega) \frac{u|\omega_r|}{|v'_r|} d\omega \right) u^2 du \\ &= \int_{\varepsilon < \varepsilon'} \bar{S}_i(v' \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon,\end{aligned}$$

et dans le cas isotrope, avec (1.74),

$$\gamma_i^{es}(\varepsilon') = \int_{\varepsilon < \varepsilon'} s_i(\sqrt{2\varepsilon'} \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon. \quad (1.76)$$

Relations de réciprocité

Proposition 2 *Les fonctions $\bar{S}_i(v' \rightarrow u)$, $\sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon)$, et $s_i(u' \rightarrow u)$ vérifient les relations de réciprocité :*

$$u\bar{S}_i(v' \rightarrow u) = u''\bar{S}_i(v' \rightarrow u'') \text{ avec } u'' = \sqrt{u'^2 - u^2}, \quad (1.77)$$

$$\sqrt{\varepsilon} \sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) = \sqrt{\varepsilon''} \sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon'') \text{ avec } \varepsilon'' = \varepsilon' - \varepsilon, \quad (1.78)$$

$$us_i(u' \rightarrow u) = u''s_i(u' \rightarrow u'') \text{ avec } u'' = \sqrt{u'^2 - u^2}. \quad (1.79)$$

Démonstration : Reprenons le nombre d'électrons créés pour un électron incident de vitesse v' , donné par (1.75). Le passage en coordonnées sphériques $v = u\omega$ nous permet aussi d'écrire :

$$\gamma_i^{es}(v') = \int_{u < u'} \left(\int_{\sigma_i \omega_r < 0} S_i(v' \rightarrow u\omega) \frac{u|\omega_r|}{|v'_r|} d\omega \right) u^2 du \quad (1.80)$$

$$= \int_{u < u'} \bar{S}_i(v' \rightarrow u) u^2 du \quad (1.81)$$

d'après la définition (1.71), ce qui signifie que

$$d\mathcal{N}_2 = \bar{S}_i(v' \rightarrow u) u^2 du$$

est le nombre d'électrons réémis (pour un électron incident de vitesse v') avec une vitesse dans $[u, u + du]$. Or l'émission secondaire est la création de deux électrons qui se partagent l'énergie de l'électron incident. Aussi, pour tout électron créé dont le module de la vitesse est dans $[u, u + du]$, il y a un autre électron émis dont le module de la vitesse est dans $[u'', u'' + du'']$, avec $u'' = \sqrt{u'^2 - u^2}$ et $du'' = \frac{u}{\sqrt{u'^2 - u^2}} du$. Si l'on reprend le nombre des électrons créés pour un électron incident :

$$\gamma_i^{es}(v') = \int_{u < u'} \left(\int_{\sigma_i \omega_r < 0} S_i(v' \rightarrow u''\omega) \frac{u''|\omega_r|}{|v'_r|} d\omega \right) u u'' du \quad (1.82)$$

$$= \int_{u < u'} \bar{S}_i(v' \rightarrow u'') u u'' du, \quad (1.83)$$

on voit que le nombre des électrons dans $[u'', u'' + du'']$ vaut :

$$d\mathcal{N}_3 = \bar{S}_i(v' \rightarrow u'') u u'' du.$$

Ainsi, pendant une émission secondaire, $d\mathcal{N}_2 = d\mathcal{N}_3$, d'où la relation (1.77).

La relation (1.78) en découle. En effet, (1.77) peut aussi s'écrire :

$$\bar{S}_i(\sqrt{2\varepsilon'}\omega' \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) = \frac{\sqrt{\varepsilon''}}{\sqrt{\varepsilon}} \bar{S}_i(\sqrt{2\varepsilon'}\omega' \rightarrow \sqrt{2\varepsilon''}) \text{ avec } \varepsilon'' = \varepsilon' - \varepsilon,$$

et en rappelant (1.72) on trouve (1.78).

Enfin, la fonction s est définie dans le cas isotrope et alors on avait l'identité $\bar{S}_i(v' \rightarrow u) = s_i(u' \rightarrow u)$, d'où (1.79).

Lien avec les données expérimentales dans le cas isotrope

Afin d'être incorporé au modèle SHE pour la modélisation réaliste d'un SPT, il faut proposer un lien entre les données expérimentales et le calcul du terme de collision défini dans le lemme 5. Prouvons la

Proposition 3 *Soit $\sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon)$ défini dans la proposition 5. Soient ε et ε'' les énergies des deux électrons réémis. Supposons que lorsque l'électron incident a pour énergie ε' , alors ε et ε'' se répartissent de manière uniforme dans les intervalles $[0, \chi\varepsilon']$ et $[(1 - \chi)\varepsilon', \varepsilon']$, avec $\chi \ll 1$.*

Alors dans le cas isotrope, et lorsque l'on considère les nombres d'électrons réémis par émission secondaire définis dans la section 1.3.1 :

$$\sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) = \begin{cases} 0 & \text{pour } \varepsilon' < \varepsilon_1 + \varepsilon_g \\ \frac{\varepsilon'}{\chi(\varepsilon' - \varepsilon_g)} (\gamma(\varepsilon') - 1) \mathbb{I}_{I(\varepsilon' - \varepsilon_g)}(\varepsilon - \varepsilon_g) & \text{pour } \varepsilon' > \varepsilon_1 + \varepsilon_g \end{cases} \quad (1.84)$$

Démonstration : Par souci de clarté, nous prenons d'abord le cas où le potentiel de gaine est nul. Nous notons avec un exposant \dagger toutes les quantités que nous calculons dans ce cas. Dans le paragraphe suivant nous donnerons les résultats lorsque le potentiel de gaine est strictement positif.

Lorsque la réémission est isotrope, nous rappelons que le nombre d'électrons réémis à la paroi i est donné par (1.76) :

$$\gamma_i^{es}(\varepsilon') = \int_{\varepsilon < \varepsilon'} s_i(\sqrt{2\varepsilon'} \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon.$$

Dans cette expression, $s_i(\sqrt{2\varepsilon'} \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon$ est le nombre d'électrons réémis par la paroi avec une énergie dans $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$, pour un électron incident d'énergie ε' , et $s_i(\sqrt{2\varepsilon'} \rightarrow \sqrt{2\varepsilon})$ est lié à S_i par (1.74). Soient ε et ε'' les énergies des deux électrons réémis. Nous postulons que l'un des électrons emporte une faible part de l'énergie de l'électron incident $0 < \varepsilon < \chi\varepsilon'$, avec $\chi \ll 1$. L'autre électron réémis emporte le reste de l'énergie $(1 - \chi)\varepsilon' < \varepsilon'' < \varepsilon'$. De plus, nous supposons que les énergies des électrons réémis se répartissent de manière uniforme dans les intervalles $[0, \chi\varepsilon']$ et $[(1 - \chi)\varepsilon', \varepsilon']$, c'est-à-dire :

$$s_i^\dagger(\sqrt{2\varepsilon'} \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon = a_i^\dagger(\varepsilon') \mathbb{I}_{I(\varepsilon')}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (1.85)$$

$$\text{avec } I(\varepsilon') = [0, \chi\varepsilon'] \cup [(1 - \chi)\varepsilon', \varepsilon'], \quad (1.86)$$

de sorte que :

$$\begin{aligned} \gamma_i^{est\dagger}(\varepsilon') &= \int_{\varepsilon < \varepsilon'} a_i^\dagger(\varepsilon') \mathbb{I}_{I(\varepsilon')}(\varepsilon) d\varepsilon \\ &= 2\chi\varepsilon' a_i^\dagger(\varepsilon'). \end{aligned}$$

En pratique, la donnée est le nombre d'électrons réémis par la paroi ; aussi, si on se donne $\gamma_i^{est\dagger}$, alors nous connaissons :

$$a_i^\dagger(\varepsilon') = \frac{\gamma_i^{est\dagger}(\varepsilon')}{2\chi\varepsilon'},$$

et par suite :

$$\begin{aligned}
 s_i^\dagger(\sqrt{2\varepsilon'} \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) &= \frac{a_i^\dagger(\varepsilon')}{\sqrt{2\varepsilon}} \mathbb{I}_{I(\varepsilon')}(\varepsilon) \\
 \sigma^\dagger(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) &= \frac{\varepsilon' \sqrt{2\varepsilon}}{2} \sum_{i=0,1} s_i^\dagger(u' \rightarrow u) \\
 &= \frac{\varepsilon' \sqrt{2\varepsilon}}{2} \sum_{i=0,1} \frac{a_i^\dagger(\varepsilon')}{\sqrt{2\varepsilon}} \mathbb{I}_{I(\varepsilon')}(\varepsilon).
 \end{aligned}$$

Cas $\varepsilon_g \neq 0$ Dans ce cas, les électrons incidents arrivent à la paroi avec une énergie diminuée du potentiel de gaine ε_g , et *les deux* électrons émergents gagnent l'énergie ε_g . Nous remarquons que, de ce fait, l'émission secondaire ne conserve pas l'énergie.

Le lien avec le paragraphe précédent peut s'exprimer comme suit :

$$\sqrt{2\varepsilon} s_i^\dagger(\sqrt{2\varepsilon'} \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) = \sqrt{2(\varepsilon + \varepsilon_g)} s_i \left(\sqrt{2(\varepsilon' + \varepsilon_g)} \rightarrow \sqrt{2(\varepsilon + \varepsilon_g)} \right),$$

qui se déduit du fait qu'un électron d'énergie $\varepsilon' + \varepsilon_g$ arrive à la paroi avec l'énergie ε' d'une part, et qu'un électron réémis par la paroi avec l'énergie ε gagne ε_g en repartant. Ainsi, en écrivant la correspondance inverse :

$$\sqrt{2\varepsilon} s_i(\sqrt{2\varepsilon'} \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) = \sqrt{2(\varepsilon - \varepsilon_g)} s_i^\dagger \left(\sqrt{2(\varepsilon' - \varepsilon_g)} \rightarrow \sqrt{2(\varepsilon - \varepsilon_g)} \right) \quad (1.87)$$

nous sommes à même d'utiliser les résultats du paragraphe précédent :

$$s_i(\sqrt{2\varepsilon'} \rightarrow \sqrt{2\varepsilon}) = \frac{a_i^\dagger(\varepsilon' - \varepsilon_g)}{\sqrt{2\varepsilon}} \mathbb{I}_{I(\varepsilon' - \varepsilon_g)}(\varepsilon - \varepsilon_g), \quad (1.88)$$

avec

$$\begin{aligned}
 a_i^\dagger(\varepsilon' - \varepsilon_g) &= \frac{\gamma_i^{es\dagger}(\varepsilon' - \varepsilon_g)}{2\chi(\varepsilon' - \varepsilon_g)}, \\
 &= \frac{\gamma_i^{es}(\varepsilon')}{2\chi(\varepsilon' - \varepsilon_g)}
 \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned}
 \sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) &= \frac{\varepsilon' \sqrt{2\varepsilon}}{2} \sum_{i=0,1} s_i(u' \rightarrow u) \\
 &= \frac{\varepsilon' \sqrt{2\varepsilon}}{2} \sum_{i=0,1} \frac{a_i^\dagger(\varepsilon' - \varepsilon_g)}{\sqrt{2\varepsilon}} \mathbb{I}_{I(\varepsilon' - \varepsilon_g)}(\varepsilon - \varepsilon_g) \\
 &= \frac{\varepsilon'}{2} \sum_{i=0,1} \frac{\gamma_i^{es}(\varepsilon')}{2\chi(\varepsilon' - \varepsilon_g)} \mathbb{I}_{I(\varepsilon' - \varepsilon_g)}(\varepsilon - \varepsilon_g) \\
 &= \frac{\varepsilon' \gamma^{es}(\varepsilon')}{2\chi(\varepsilon' - \varepsilon_g)} \mathbb{I}_{I(\varepsilon' - \varepsilon_g)}(\varepsilon - \varepsilon_g),
 \end{aligned}$$

en considérant que les propriétés des deux parois sont identiques $\gamma_1^{es} = \gamma_0^{es} = \gamma^{es}$. Finalement, le résultat annoncé par la proposition découle des résultats de la section 1.3.1 sur le nombre d'électrons réémis par émission secondaire γ^{es} .

1.4 Collisions en volume

1.4.1 Sections efficaces de collision

Les trois types de collisions en volume telles qu'elles sont décrites dans la section 1.1 dépendent de plusieurs paramètres physiques : les énergies d'excitation et d'ionisation, et les sections efficaces de collision.

A chaque type de collision correspond une section efficace de collision. Chaque section efficace peut être mesurée expérimentalement et elle est liée avec le temps moyen entre deux collisions par la relation :

$$\frac{1}{\tau_{coll}} = \nu_{coll} = \sigma_{coll}(v) n_a(z) v,$$

où $n(z)$ est la densité des atomes (contre lesquels se font les collisions), et ν_{coll} est la fréquence moyenne des collisions. Cette définition indique que la section efficace de collision quantifie la facilité avec laquelle un électron participe à une collision.

Dans la suite de cette section, nous utiliserons la fréquence moyenne de collisions plutôt que le temps moyen entre deux collisions. Pour chaque phénomène, nous avons repris les données expérimentales publiées par Puech et Mizzi [33], qui donnent $\varepsilon \mapsto \sigma(\varepsilon)$ pour les trois types de collisions dont nous tenons compte. Nous ne détaillerons pas ce point, qui n'apparaît que lors de l'implémentation en tant que donnée du problème.

1.4.2 Excitation

En utilisant $\sigma_{exc}(v)$ la section efficace d'excitation du Xe , nous savons que cet événement se produit en moyenne avec la fréquence $\nu_{exc}(v) = \sigma_{exc}(v) n(z) v$. Avec l'énergie d'excitation Δ_e , ce sont les seules données dont nous disposons pour modéliser ce phénomène. Prouvons la

Proposition 4 *La contribution de l'excitation au second membre de (1.53), définie par*

$$\mathbb{Q}_{exc}(N)(z, \varepsilon, t) = \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \mathbf{Q}_{exc}(N) dr d\omega$$

se déduit des données expérimentales Δ_e et $\nu_{exc}(\varepsilon)$ par la relation :

$$\mathbb{Q}_{exc}(\varepsilon, z) = \sqrt{2\varepsilon} \left(-\nu_{exc}(\varepsilon) N(\varepsilon, z) + \nu_{exc}(\varepsilon + \Delta_e) \sqrt{\frac{\varepsilon + \Delta_e}{\varepsilon}} \cdot N(\varepsilon + \Delta_e, z) \right). \quad (1.89)$$

Pour démontrer cette proposition, nous allons dans un premier temps revenir à l'expression naturelle d'un processus de collision volumique, puis nous nous ramènerons à (1.20). Enfin, nous calculerons la contribution de ces opérateurs au modèle SHE.

Opérateur de collision sur f

On note $\varepsilon(v) = \varepsilon_v = \frac{v^2}{2}$ et on propose la forme suivante pour l'opérateur de collision qui décrit l'excitation :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{exc}(v) = -\nu_{exc}(v) \cdot f(v) + \int_{\mathbb{R}^3} k(v' \mapsto v) f(v') \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_e) dv'. \quad (1.90)$$

Le premier terme est ce qui disparaît de la population de vitesse v' , le second est ce qui apparaît (ce sont des électrons qui ont perdu l'énergie Δ_e). La mesure de Dirac $\delta(\cdot)$ introduit dans l'intégrale la conservation de l'énergie lors de l'interaction.

Lien avec les données expérimentales

Il faut donner une forme à k en fonction des données physiques. Nous pouvons faire deux hypothèses pour nous y aider :

première hypothèse : la réémission est isotrope, i.e. $k(v' \mapsto v) = \bar{k}(v', \varepsilon_v)$, c'est-à-dire que la réémission ne dépend pas de la direction de la particule réémise. Elle peut toutefois dépendre de la direction de la particule incidente.

deuxième hypothèse : les collisions conservent le nombre de particules :

$$\int_{\mathbb{R}^3} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{exc}(v) dv = 0, \quad \forall f \quad (1.91)$$

Cette deuxième hypothèse se traduit par une expression de \bar{k} en fonction de ν_{exc} . En effet, elle s'écrit :

$$-\int_{\mathbb{R}^3} \nu_{exc}(\varepsilon_v) f(v) dv + \int_{\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3} k(v' \mapsto v) f(v') \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_e) dv' dv = 0 \quad (1.92)$$

soit, en interchangeant les intégrations en v et v' ,

$$\int_{\mathbb{R}^3} f(v) \left[-\nu_{exc}(\varepsilon_v) + \int_{\mathbb{R}^3} k(v \mapsto v') \delta(\varepsilon_v - \varepsilon_{v'} - \Delta_e) dv' \right] dv = 0. \quad (1.93)$$

Comme cette égalité est vraie pour toute fonction f , nous obtenons :

$$\int_{\mathbb{R}^3} k(v \mapsto v') \delta(\varepsilon_v - \varepsilon_{v'} - \Delta_e) dv' = \nu_{exc}(\varepsilon_v) \quad (1.94)$$

et en introduisant l'hypothèse 1, et $\varepsilon_{v'} = \varepsilon_v - \Delta = Cte$:

$$\bar{k}(v, \varepsilon_{v'} = \varepsilon_v - \Delta_e) \int_{\mathbb{R}^3} \delta(\varepsilon_v - \varepsilon_{v'} - \Delta_e) dv' = \nu_{exc}(\varepsilon_v). \quad (1.95)$$

Evaluons l'intégrale à l'aide de la formule de la co-aire [23] :

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \delta(\varepsilon_v - \varepsilon_{v'} - \Delta_e) dv' &= \int_{\mathbb{R}^3} \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v + \Delta_e) dv' \\ &= \int_{\varepsilon_{v'} = \varepsilon_v - \Delta_e} \frac{dS(v')}{|\nabla \varepsilon(v')|}. \end{aligned}$$

Or $\varepsilon(v') = v'^2/2$, i.e. $|\nabla\varepsilon(v')| = |v'|$ et nous cherchons à évaluer ce gradient sur la sphère \mathbb{S} solution de $\varepsilon_{v'} = \varepsilon_v - \Delta_e$. Sur cette sphère, $v'^2 = v^2 + 2\Delta_e$, d'où

$$|\nabla\varepsilon(v')|_{\mathbb{S}} = \sqrt{v^2 - 2\Delta_e}. \quad (1.96)$$

Par ailleurs, la surface de la sphère vaut $4\pi|v'^2|$, c'est-à-dire $4\pi|v^2 - 2\Delta_e|$, ce qui donne :

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^3} \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v + \Delta_e) &= 4\pi \frac{|v^2 - 2\Delta_e|}{\sqrt{v^2 - 2\Delta_e}} \\ &= 4\pi \sqrt{v^2 - 2\Delta_e} \\ &= 2^{5/2}\pi \sqrt{\varepsilon_v - \Delta_e}, \end{aligned}$$

d'où

$$\bar{k}(v, \varepsilon_{v'}) = \frac{\nu_{exc}(\varepsilon_v)}{2^{5/2}\pi\sqrt{\varepsilon_v - \Delta_e}}. \quad (1.97)$$

Nous pouvons alors donner une expression à l'opérateur de collision :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{exc}(v) &= -\nu_{exc}(\varepsilon_v) \cdot f(v) + \int_{\mathbb{R}^3} \bar{k}(v', \varepsilon_v) f(v') \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_e) dv' \\ &= -\nu_{exc}(\varepsilon_v) \cdot f(v) + \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\nu_{exc}(\varepsilon_{v'})}{2^{5/2}\pi\sqrt{\varepsilon_{v'} - \Delta_e}} f(v') \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_e) dv', \end{aligned}$$

ce qui finalement nous donne :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{exc}(v) = -\nu_{exc}(\varepsilon_v) \cdot f(v) + \frac{\nu_{exc}(\varepsilon_v + \Delta_e)}{2^{5/2}\pi\sqrt{\varepsilon_v}} \int_{\mathbb{R}^3} f(v') \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_e) dv'. \quad (1.98)$$

Remarque 1 Il est pertinent de définir une moyenne de f comme suit, en écrivant que $\int_{\mathbb{R}^3} \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v) dv' = 2^{5/2}\pi\sqrt{\varepsilon_v}$:

$$\begin{aligned} [f]_{\varepsilon_v} &= \frac{\int_{\mathbb{R}^3} f(v') \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v) dv'}{\int_{\mathbb{R}^3} \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v) dv'} \\ &= \frac{1}{2^{5/2}\pi\sqrt{\varepsilon_v}} \int_{\mathbb{R}^3} f(v') \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v) dv', \end{aligned}$$

et $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{exc}(v)$ s'écrit alors sous la forme :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{exc}(v) = -\nu_{exc}(\varepsilon_v) \cdot f(v) + \sqrt{\frac{\varepsilon_v + \Delta_e}{\varepsilon_v}} \nu_{exc}(\varepsilon_v + \Delta_e) [f]_{\varepsilon_{v'} = \varepsilon_v + \Delta_e}. \quad (1.99)$$

Scaling

Ecrivons (1.98) sous une forme équivalente :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{exc}(v) &= -\nu_{exc}(\varepsilon_v) (f(v) - [f]_{\varepsilon_v}) \\ &+ \left[-\nu_{exc}(\varepsilon_v) [f]_{\varepsilon_v} + \frac{\nu_{exc}(\varepsilon_v + \Delta_e)}{2^{5/2}\pi\sqrt{\varepsilon_v}} \int_{\mathbb{R}^3} f(v') \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_e) dv' \right]. \end{aligned}$$

Conformément à (1.20), nous décomposons $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{exc}$ en un opérateur élastique $\mathbf{Q}_{exc}^{elas}(f)$ (supposé d'ordre 1) et un opérateur inélastique $\mathbf{Q}_{exc}(f)$ (supposé d'ordre η^2) selon :

$$\begin{aligned}\mathbf{Q}_{exc}^{elas}(f) &= -\nu_{exc}(\varepsilon_v) (f(v) - [f]_{\varepsilon_v}) \\ \mathbf{Q}_{exc}(f) &= -\frac{\nu_{exc}(\varepsilon_v)}{\eta^2} [f]_{\varepsilon_v} + \frac{\nu_{exc}(\varepsilon_v + \Delta_e)}{\eta^2 2^{5/2} \pi \sqrt{\varepsilon_v}} \int_{\mathbb{R}^3} f(v') \delta(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_e) dv',\end{aligned}$$

qui nous redonne bien $\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{exc}(v)$ en sommant $\mathbf{Q}_{elas}(f) + \eta^2 \mathbf{Q}_{inel}(f)$.

Contribution au second membre du modèle SHE (1.53)

Comme cela est déjà décrit dans le paragraphe 1.2.3, la contribution élastique sera prise en compte en ajoutant $\nu_{exc}(\varepsilon_v)$ aux autres fréquences de collision dans le calcul du temps de relaxation total.

La contribution inélastique apparaît quant à elle dans (1.53). Nous définissons :

$$\mathbf{Q}_{exc}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \mathbf{Q}_{exc}(N) dr d\omega. \quad (1.100)$$

En utilisant la formule de la co-aire de nouveau, et en remarquant que les quantités intégrées ne dépendent pas de ω on obtient :

$$\mathbf{Q}_{exc}(\varepsilon, z) = 4\pi \left(-\nu_{exc}(\varepsilon) \frac{N(\varepsilon, z)}{4\pi} + \frac{\nu_{exc}(\varepsilon + \Delta_e)}{\pi 2^{5/2} \sqrt{\varepsilon}} \cdot N(\varepsilon + \Delta_e, z) \sqrt{2} \sqrt{\varepsilon + \Delta_e} \right) \quad (1.101)$$

ce qui, après simplification, donne la proposition 4.

1.4.3 Ionisation

Nous reprenons une démarche très similaire pour les ionisations. Nous obtenons la

Proposition 5 *La contribution de l'ionisation au second membre de (1.53), définie par*

$$\mathbf{Q}_{ion}(N)(z, \varepsilon, t) = \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \mathbf{Q}_{ion}(N) dr d\omega$$

se déduit des données expérimentales Δ_i et $\nu_{ion}(\varepsilon)$ par la relation :

$$\mathbf{Q}_{ion}(N)(z, \varepsilon, t) = \sqrt{2\varepsilon} \left(\frac{-\nu_{ion}(\varepsilon) \sqrt{2\varepsilon}}{\eta^2} N(z, \varepsilon, t) + \int_{\mathbb{J}(\chi, \Delta_i, \varepsilon)} A(\varepsilon') N(z, \varepsilon', t) d\varepsilon' \right), \quad (1.102)$$

avec

$$A(\varepsilon') = \frac{\nu_{ion}(\varepsilon') \sqrt{2\varepsilon'}}{\eta^2 \chi(\varepsilon' - \Delta_i)}$$

et $\mathbb{J}(\chi, \Delta_i, \varepsilon)$ donné par :

$$\mathbb{J}(\chi, \Delta_i, \varepsilon) = \left[\varepsilon + \Delta_i, \frac{\varepsilon}{1 - \chi} + \Delta_i \right] \cup \left[\frac{\varepsilon}{\chi} + \Delta_i, +\infty \right[.$$

Opérateur de collision sur f

Un électron de vitesse v' entre en collision ionisante avec un neutre. Il perd l'énergie Δ_i pour dépasser le seuil d'ionisation et libère un électron de l'atome. Nous supposons que les deux électrons émis sont indiscernables, c'est-à-dire qu'il n'est pas possible de savoir lequel était l'électron incident et lequel a quitté l'atome. L'énergie restante $\varepsilon_{v'} - \Delta_i$ est répartie entre les deux électrons émis :

$$\varepsilon_{v'} - \Delta_i = \varepsilon_v + \varepsilon_{v''}, \text{ ou } \varepsilon_{v'} = \varepsilon_v + \varepsilon_{v''} + \Delta_i. \quad (1.103)$$

La probabilité qu'une particule incidente de vitesse v' fasse une transition dans $dv dv''$ autour de $(\varepsilon_v, \varepsilon_{v''})$ s'écrit :

$$\phi(v' \mapsto v, v'') \delta(\varepsilon_{v'} - (\varepsilon_v + \varepsilon_{v''} + \Delta_i)) dv dv'' \quad (1.104)$$

avec la *convention* liée à l'indiscernabilité :

$$\varepsilon_v < \varepsilon_{v''}. \quad (1.105)$$

Pour la fonction de distribution, nous proposons :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ion} (v) &= -\tilde{\nu}_{ion}(v) f(v) \\ &+ \int_{\mathbb{R}^3} \int_{v'', \varepsilon_v < \varepsilon_{v''}} \phi(v' \mapsto v, v'') \delta(\varepsilon_{v'} - (\varepsilon_v + \varepsilon_{v''} + \Delta_i)) f(v') dv'' dv' \\ &+ \int_{\mathbb{R}^3} \int_{v'', \varepsilon_v > \varepsilon_{v''}} \phi(v' \mapsto v'', v) \delta(\varepsilon_{v'} - (\varepsilon_v + \varepsilon_{v''} + \Delta_i)) f(v') dv'' dv'. \end{aligned}$$

Remarque 2 $\tilde{\nu}_{ion}(v)$ est nul pour $\varepsilon_v < \Delta_i$ puisque seuls les électrons franchissant le seuil d'ionisation participent à des collisions ionisantes.

Cette forme exprime d'une part la perte des électrons de vitesse v lorsqu'ils entrent en collision ionisante, d'autre part le gain lorsqu'ils sont le produit d'une telle collision. Pour ce dernier, deux termes doivent être écrits selon que l'électron produit est celui de plus faible énergie ou l'autre. Les conditions $\varepsilon_v < \varepsilon_{v''}$ et $\varepsilon_v > \varepsilon_{v''}$ peuvent s'exprimer, compte tenu de la conservation de l'énergie par les inégalités $\varepsilon_v < \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2}$ et $\varepsilon_v > \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2}$. Précisons alors les termes de gain.

Similairement à la démarche adoptée dans la section 1.3.4, nous prouvons le

Lemme 6 Si l'on suppose que l'ionisation est un phénomène isotrope, alors l'opérateur modélisant ces collisions peut être écrit :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ion} (v) = -\nu_{ion}(v) f(v) + 4\pi \int_{\varepsilon_{v'} > \varepsilon_v + \Delta_i} S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v) f(\sqrt{2\varepsilon_{v'}} \omega) \frac{\sqrt{2\varepsilon_{v'}}}{\sqrt{2\varepsilon_v}} d\varepsilon_{v'},$$

où $S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v)$ vérifie la relation de réciprocité :

$$S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_i) = S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v).$$

Preuve : Définissons la probabilité qu'un électron incident fasse une transition vers *l'un* des deux électrons réémis. Selon que l'on observe le plus énergétique ou le moins énergétiques, nous parlerons de :

$$\Sigma(v' \mapsto v) = \begin{cases} \text{pour } \left(0 < \varepsilon_v < \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2}\right) : \\ \Sigma_1(v' \mapsto v) = \int_{v'', \varepsilon_v < \varepsilon_{v''}} -\phi(v' \mapsto v, v'') \delta(\varepsilon_{v'} - (\varepsilon_v + \varepsilon_{v''} + \Delta_i)) dv'' \\ \text{pour } \left(\varepsilon_{v'} - \Delta_i > \varepsilon_v > \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2}\right) : \\ \Sigma_2(v' \mapsto v) = \int_{v'', \varepsilon_v > \varepsilon_{v''}} \phi(v' \mapsto v'', v) \delta(\varepsilon_{v'} - (\varepsilon_v + \varepsilon_{v''} + \Delta_i)) dv'' \end{cases} \quad (1.106)$$

A ce stade, l'opérateur de collision s'écrit :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ion}(v) &= -\tilde{\nu}_{ion}(v)f(v) \\ &+ \int_{v', \varepsilon_v < \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2}} \Sigma_1(v' \mapsto v)f(v') dv' \\ &+ \int_{v', \varepsilon_v < \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2}} \Sigma_2(v' \mapsto v)f(v') dv' \end{aligned}$$

Par passage en coordonnées sphériques $v = |v|\omega$ où $\omega \in \mathbb{S}^2$, nous pouvons définir la probabilité qu'une particule incidente de vitesse v' fasse une transition dans $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$:

$$\tilde{\Sigma}(v' \mapsto \varepsilon) d\varepsilon = \begin{cases} \text{pour } 0 < \varepsilon < \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2} : \\ \sqrt{2\varepsilon} \left(\int_{\mathbb{S}^2} \Sigma_1(v' \mapsto \sqrt{2\varepsilon} \omega) d\omega \right) d\varepsilon \\ \text{pour } \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2} < \varepsilon < \varepsilon_{v'} - \Delta_i : \\ \sqrt{2\varepsilon} \left(\int_{\mathbb{S}^2} \Sigma_2(v' \mapsto \sqrt{2\varepsilon} \omega) d\omega \right) d\varepsilon \end{cases} \quad (1.107)$$

Cette grandeur nous aide à identifier une relation de réciprocité. En effet, puisque les particules sont réémises par paires, nous avons l'égalité $\tilde{\Sigma}(v' \mapsto \varepsilon_v) d\varepsilon_v = \tilde{\Sigma}(v' \mapsto \varepsilon_{v''}) d\varepsilon_{v''}$ avec $\varepsilon_{v''} = \varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_i$, ce qui s'écrit :

$$\sqrt{2\varepsilon_v} \left(\int_{\mathbb{S}^2} \Sigma_1(v' \mapsto \sqrt{2\varepsilon_v} \omega) d\omega \right) = \sqrt{2\varepsilon_{v''}} \left(\int_{\mathbb{S}^2} \Sigma_2(v' \mapsto \sqrt{2\varepsilon_{v''}} \omega) d\omega \right). \quad (1.108)$$

Faisons à présent l'hypothèse d'isotropie : la fréquence de collision ne dépend que de l'énergie de la particule incidente, et les probabilités $\Sigma_{1,2}$ ne dépendent que des énergies des particules en jeu. Ceci s'écrit :

$$\begin{cases} \tilde{\nu}_{ion}(v) = \nu_{ion}(\varepsilon_v) \\ \Sigma_1(v' \mapsto v) = S_1(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v) \\ \Sigma_2(v' \mapsto v) = S_2(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v). \end{cases}$$

En utilisant la relation de réciprocité, on peut exprimer S_2 en fonction de S_1 . En effet, pour les fonctions S_i , elle s'écrit (4π se compensant) :

$$\sqrt{2\varepsilon_v} S_1(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v) = \sqrt{2(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_i)} S_2(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_i), \quad (1.109)$$

ce qui donne :

$$S_2(\varepsilon_{v'} \mapsto \tilde{\varepsilon}) = \frac{\sqrt{2(\varepsilon_{v'} - \tilde{\varepsilon} - \Delta_i)}}{\sqrt{2\tilde{\varepsilon}}} S_1(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_{v'} - \tilde{\varepsilon} - \Delta_i). \quad (1.110)$$

On obtient, à ce stade :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ion} (v) &= -\nu_{ion}(\varepsilon_v) f(v) \\ &+ \int_{v', \varepsilon_{v'} > 2\varepsilon_v + \Delta_i} S_1(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v) f(v') dv' \\ &+ \int_{v', \varepsilon_v + \Delta_i < \varepsilon_{v'} < 2\varepsilon_v + \Delta_i} S_1(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_i) \frac{\sqrt{2(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_i)}}{\sqrt{2\varepsilon_v}} f(v') dv'. \end{aligned}$$

Afin de faire le lien avec les données physiques, il nous est utile de définir une fonction pour laquelle la relation de réciprocité a la forme plus simple :

$$S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_i) = S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v). \quad (1.111)$$

Ceci est vérifié par la fonction :

$$S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v) = \begin{cases} \text{pour } 0 < \varepsilon_v < \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2} : \\ \quad S_1(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v) \sqrt{2\varepsilon_v} \\ \text{pour } \varepsilon_{v'} - \Delta_i > \varepsilon_v > \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2} : \\ \quad S_1(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_i) \sqrt{2(\varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_i)} \end{cases}. \quad (1.112)$$

En effet, prenons le cas où $\varepsilon_v < \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2}$. Posons $\tilde{\varepsilon} = \varepsilon_{v'} - \varepsilon_v - \Delta_i$. La condition sur ε_v signifie que $\tilde{\varepsilon} > \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2}$ et $\varepsilon_v > 0$ amène aussi $\tilde{\varepsilon} < \varepsilon_{v'} - \Delta_i$. Ainsi, avec la définition de S nous avons :

$$\begin{aligned} S(\varepsilon_{v'} \mapsto \tilde{\varepsilon}) &= S_1(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_{v'} - \tilde{\varepsilon} - \Delta_i) \sqrt{2(\varepsilon_{v'} - \tilde{\varepsilon} - \Delta_i)} \\ &= S_1(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v) \sqrt{2\varepsilon_v} \\ &= S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v) \text{ car } \varepsilon_v < \frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2}. \end{aligned}$$

La situation où $\frac{\varepsilon_{v'} - \Delta_i}{2} < \varepsilon_v < \varepsilon_{v'} - \Delta_i$ conduit à des calculs identiques.

Cette fonction nous permet d'écrire :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ion} (v) &= -\nu_{ion}(v) f(v) \\ &+ \int_{v', \varepsilon_{v'} > 2\varepsilon_v + \Delta_i} S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v) f(v') \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_v}} dv' \\ &+ \int_{v', \varepsilon_v + \Delta_i < \varepsilon_{v'} < 2\varepsilon_v + \Delta_i} S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v) f(v') \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_v}} dv' \end{aligned}$$

soit

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ion} (v) = -\nu_{ion}(v)f(v) + \int_{v', \varepsilon_{v'} > \varepsilon_v + \Delta_i} S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v) f(v') \frac{1}{\sqrt{2\varepsilon_v}} dv'$$

ou encore, en passant en coordonnées sphériques (ε_v, ω) :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ion} (v) = -\nu_{ion}(v)f(v) + 4\pi \int_{\varepsilon_{v'} > \varepsilon_v + \Delta_i} S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon_v) f(\sqrt{2\varepsilon_{v'}} \omega) \frac{\sqrt{2\varepsilon_{v'}}}{\sqrt{2\varepsilon_v}} d\varepsilon_{v'},$$

ce qui prouve le lemme.

Lien avec les données expérimentales

Lors d'une ionisation, un électron incident de vitesse v' produit l'émission de deux électrons de vitesse v et v'' . Nous considérons par la suite que l'ionisation est un phénomène isotrope, et qu'il suffit donc d'examiner la production d'électrons d'énergies ε et ε'' par un électron d'énergie ε' . Comme pour l'émission secondaire, nous devons décrire la répartition de l'énergie de l'électron incident entre les deux électrons émis, et nous adoptons une hypothèse similaire (voir section 1.3.4) :

Hypothèse 3 *Lorsque un électron d'énergie ε' participe à une ionisation, son énergie est répartie entre les deux électrons émis comme suit :*

$$\begin{aligned} \varepsilon' &= \Delta_i + \varepsilon + \varepsilon'' \text{ (conservation de l'énergie)} \\ \varepsilon &\in [0, \chi_i(\varepsilon' - \Delta_i)] \\ \varepsilon'' &= \varepsilon' - \varepsilon \in [(1 - \chi_i)(\varepsilon' - \Delta_i), (\varepsilon' - \Delta_i)], \end{aligned}$$

où $\chi_i \in [0, 1]$.

Notons que le potentiel d'ionisation Δ_i joue un rôle tout à fait comparable au potentiel de gaine car cette énergie est perdue par l'électron incident. Par contre, elle n'est pas regagnée lorsque les électrons sont émis.

Prouvons la

Proposition 6 *Lorsque la réémission des deux électrons émergeant d'une ionisation est isotrope, et sous l'hypothèse 3, alors :*

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ion} (\varepsilon_v) = -\nu_{ion}(\varepsilon_v)f(\varepsilon_v) + 4\pi \int_{\mathbb{R}^+} \phi(\varepsilon') \mathbb{1}_{\mathbb{J}(\chi, \Delta_i, \varepsilon)}(\varepsilon') f(\varepsilon') \frac{\sqrt{2\varepsilon'}}{\sqrt{2\varepsilon_v}} d\varepsilon'. \quad (1.113)$$

où

$$\phi(\varepsilon') = \frac{\nu_{ion}(\varepsilon')}{4\pi\chi(\varepsilon' - \Delta_i)}.$$

et

$$\mathbb{J}(\chi, \Delta_i, \varepsilon) = \left[\varepsilon + \Delta_i, \frac{\varepsilon}{1 - \chi} + \Delta_i \right] \cup \left[\frac{\varepsilon}{\chi} + \Delta_i, +\infty \right[.$$

Démonstration : Nous sommes capables de lier S et la donnée physique ν_{ion} . Soit $\nu_c(\varepsilon)$ la fréquence à laquelle des électrons sont créés. Puisqu'à chaque fois qu'un électron entre dans une collision ionisante deux électrons en sortent, $\nu_c(\varepsilon) = 2\nu_{ion}(\varepsilon)$, et nous avons l'équation bilan (en supposant toutes les quantités isotropes) :

$$4\pi \int_{\mathbb{R}^+} \nu_c(\varepsilon) f(\varepsilon) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon = 4\pi \int_{\mathbb{R}^+} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ion} (v) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon. \quad (1.114)$$

Or cette quantité vaut :

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^+} \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ion} (v) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon &= - \int_{\mathbb{R}^+} \nu_{ion}(\varepsilon) f(\varepsilon) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon \\ &\quad + 4\pi \int_{\mathbb{R}^+} \left(\int_{\varepsilon_{v'} > \varepsilon + \Delta_i} S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon) f(\varepsilon_{v'}) \frac{\sqrt{2\varepsilon_{v'}}}{\sqrt{2\varepsilon}} d\varepsilon_{v'} \right) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon \\ &= - \int_{\mathbb{R}^+} \nu_{ion}(\varepsilon) f(\varepsilon) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon \\ &\quad + 4\pi \int_{\mathbb{R}^+} \left(\int_{\varepsilon < \varepsilon_{v'} - \Delta_i} S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon) d\varepsilon \right) f(\varepsilon_{v'}) \sqrt{2\varepsilon_{v'}} d\varepsilon_{v'}, \end{aligned}$$

en permutant les intégrations.

Afin de déterminer S , proposons une forme à cette fonction. Nous procérons de la même façon que lors de la modélisation de l'émission secondaire. Nous renvoyons le lecteur à la section (1.3.4) pour la description de cette démarche. De la même façon, nous définissons les intervalles :

$$\begin{aligned} I_1(\chi, \Delta_i, \varepsilon') &= [0, \chi(\varepsilon' - \Delta_i)] \\ I_2(\chi, \Delta_i, \varepsilon') &= [(1 - \chi)(\varepsilon' - \Delta_i), \varepsilon' - \Delta_i] \\ \mathbb{I}(\chi, \Delta_i, \varepsilon') &= I_1 \cup I_2. \end{aligned}$$

Lorsque l'énergie d'un électron est dans l'intervalle I_1 , alors l'autre électron réémis a son énergie dans l'intervalle I_2 . Ceci s'écrit de manière moins fine (on ne fait plus la distinction entre I_1 et I_2) :

$$\varepsilon \in \mathbb{I}(\chi, \Delta_i, \varepsilon') \Rightarrow \varepsilon' - \varepsilon - \Delta_i \in \mathbb{I}(\chi, \Delta_i, \varepsilon'), \quad (1.115)$$

de sorte que la fonction définie par

$$S(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) = \begin{cases} \phi(\varepsilon') & \text{pour } \varepsilon \in \mathbb{I}(\chi, \Delta_i, \varepsilon') : \\ O & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (1.116)$$

satisfait la condition de réciprocité $S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon) = S(\varepsilon_{v'} \mapsto \varepsilon' - \varepsilon - \Delta_i)$. De l'équation bilan (1.114), qui est vraie pour toute fonction f , nous tirons :

$$4\pi \int_{\varepsilon < \varepsilon_{v'} - \Delta_i} S(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) d\varepsilon = 2\nu_{ion}(\varepsilon') \quad (1.117)$$

ce qui donne

$$4\pi \int_{\varepsilon < \varepsilon_v' - \Delta_i} \phi(\varepsilon') \mathbb{I}_{\mathbb{I}(\chi, \Delta_i, \varepsilon')}(\varepsilon) d\varepsilon = 2\nu_{ion}(\varepsilon'), \quad (1.118)$$

et finalement :

$$\phi(\varepsilon') = \frac{\nu_{ion}(\varepsilon')}{4\pi\chi(\varepsilon' - \Delta_i)}. \quad (1.119)$$

La fonction indicatrice $\mathbb{I}_{\mathbb{I}(\chi, \Delta_i, \varepsilon')}(\varepsilon)$ définit un domaine dans le plan $(\varepsilon, \varepsilon') \in (\mathbb{R}^+)^2$. Nous allons chercher une description de ce domaine sous la forme $\mathbb{I}_{\mathbb{J}(\chi, \Delta_i, \varepsilon)}(\varepsilon')$ de façon à rendre l'écrire de $(\frac{\partial f}{\partial t})_{ion}(v)$ plus claire. A l'aide de la figure (1.5) il devient aisément de voir que ce que nous cherchons est :

$$\mathbb{J}(\chi, \Delta_i, \varepsilon) = \left[\varepsilon + \Delta_i, \frac{\varepsilon}{1 - \chi} + \Delta_i \right] \cup \left[\frac{\varepsilon}{\chi} + \Delta_i, +\infty \right]. \quad (1.120)$$

L'opérateur de collision s'écrit alors plus simplement :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ion}(v) = -\nu_{ion}(\varepsilon_v) (f(v)) \quad (1.121)$$

$$+ 4\pi \int_{\mathbb{R}^+} \phi(\varepsilon') \mathbb{I}_{\mathbb{J}(\chi, \Delta_i, \varepsilon)}(\varepsilon') f(\varepsilon') \frac{\sqrt{2\varepsilon'}}{\sqrt{\varepsilon_v}} d\varepsilon'. \quad (1.122)$$

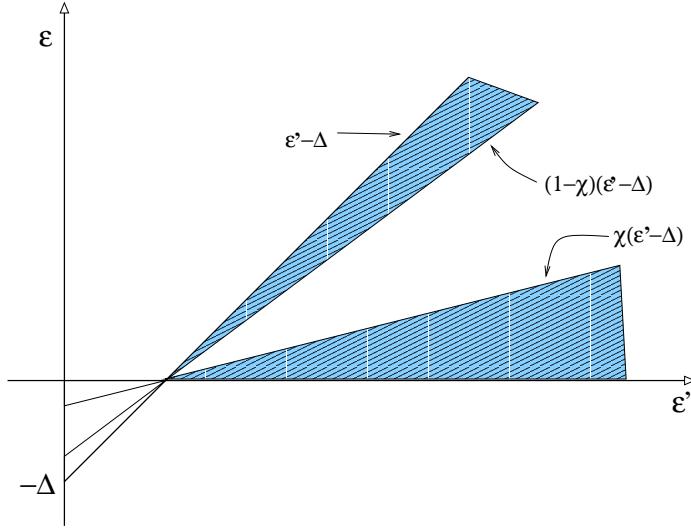


FIG. 1.5 – domaine d'intégration

Scaling

De la même façon que pour l'excitation, nous écrivons (1.121) sous la forme :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{ion}(v) = -\nu_{ion}(\varepsilon_v) (f(v) - [f]_{\varepsilon_v})$$

$$+ \left[-\nu_{ion}(\varepsilon_v) [f]_{\varepsilon_v} + 4\pi \int_{\mathbb{R}^+} \phi(\varepsilon') \mathbb{I}_{\mathbb{J}(\chi, \Delta_i, \varepsilon)}(\varepsilon') f(\varepsilon') \frac{\sqrt{2\varepsilon'}}{\sqrt{\varepsilon_v}} d\varepsilon' \right],$$

et nous reprenons (1.21) :

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{elas}(f) &= -\nu_{ion}(\varepsilon_v) (f(v) - [f]_{\varepsilon_v}) \\ \mathbf{Q}_{inel}(f) &= -\frac{\nu_{ion}(\varepsilon_v)}{\eta^2} [f]_{\varepsilon_v} + 4\pi \int_{\mathbb{R}^+} \frac{\phi(\varepsilon')}{\eta^2} \mathbb{I}_{\mathbb{J}(\chi, \Delta_i, \varepsilon)}(\varepsilon') f(\varepsilon') \frac{\sqrt{2\varepsilon'}}{\sqrt{\varepsilon_v}} d\varepsilon', \end{aligned}$$

Contribution au second membre du modèle SHE (1.53)

D'une façon quasiment identique à l'excitation, l'ionisation a une contribution élastique par le biais de la fréquence d'ionisation, qui est prise en compte lors du calcul du temps de relaxation total.

La contribution inélastique, défi nie par

$$\mathbf{Q}_{ion}(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} \int_0^1 \mathbf{Q}_{ion}(N)(\varepsilon_v) dr d\omega \quad (1.123)$$

reste à calculer. L'intégration ne pose aucun problème, et termine la démonstration de la proposition 6.

1.5 Expression analytique du coefficient de diffusion

Dans le cas où on néglige les collisions en volume comme dans celui où on les incorpore, la démarche reste la même et peut se décomposer en deux parties :

- calcul de D^B i.e. résolution du système (1.47,1.48). Dans les cas qui nous intéressent on parvient à une expression analytique de cette fonction.
- L'obtention de la forme de D^B permet de calculer explicitement l'intégrale correspondant au coefficient de diffusion (1.52).

Nous présentons ici une façon de mener ce calcul, qui est une succession d'étapes simples mais qui ne masque pas la complexité des fonctions calculées. Toutefois, ce calcul a trouvé une alternative beaucoup plus élégante dans [19] et nous renvoyons le lecteur au chapitre 4.

Au terme du calcul, \mathbb{D} est une fonction défi nie par une intégrale (il reste une variable par rapport à laquelle on ne peut pas intégrer explicitement) et il reste à donner un moyen de calculer les valeurs de $\mathbb{D}(z, \varepsilon)$ pour un coût raisonnable. Nous en donnons une description détaillée dans la section 1.7.

1.5.1 Calcul de $D^B(r, \omega)$ dans le cas isotrope

Afin de calculer l'intégrale défi nie par (1.52), il faut calculer D^B la solution de (1.47,1.48). Dans ce problème, nous remarquons que toutes les variables autres que r et

ω sont de simples paramètres, aussi la difficulté consiste à chercher une fonction de r et ω qui soit solution de ces équations. Nous introduisons les notations :

$$\begin{aligned} D(r, \omega) &= D(z, u, t; r, \omega) \\ D(r = R) &= D(z, u, t; R, \omega) \\ D(r = R, \sigma_r = +1) &= D(z, u, t; R, \omega) \text{ pour } \omega_r > 0 \\ D(r = R, \sigma_r = -1) &= D(z, u, t; R, \omega) \text{ pour } \omega_r < 0 \end{aligned}$$

Par ailleurs, dans ce qui suit nous nous plaçons dans le cas où les collisions diffuses à la paroi sont supposées isotropes (voir le paragraphe 1.3.4 pour une discussion plus détaillée sur l'isotropie des phénomènes aux parois), c'est-à-dire que les noyaux intégraux définis en (1.7) sont :

$$K_i(z, u, \omega, \omega') = \frac{\omega'_r}{\pi}. \quad (1.124)$$

Par souci de simplicité nous noterons $\alpha_i = (1 - \gamma_i^e)$. Montrons la

Proposition 7 *Lorsque les collisions diffuses sont isotropes et que l'on ne considère que $B^\eta(r, z) = B(0, z)$, alors la solution du problème tel qu'il est défini en (1.47, 1.48)*

$$\begin{aligned} \mathcal{A} D^B(x, v) &= \omega_z, \quad (x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3, \\ \mathcal{B}_i D^B(z, v) &= 0, \quad z \in \mathbb{R}, \quad v \in \mathbb{R}^3, \quad \sigma_i v_r < 0 \end{aligned}$$

vaut, pour $\sigma_r = +1$:

$$\begin{aligned} \bar{D}(r, \sigma_r = +1) &= \frac{\tau}{1 + (B\tau)^2} \left[\bar{\omega}_\theta \left\{ A_\theta^+ e^{-\chi(r-1)} + \sin(br) - B\tau \cos(br) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \bar{\omega}_z \left\{ A_z^+ e^{-\chi(r-1)} + B\tau \sin(br) + \cos(br) \right\} \right] \end{aligned} \quad (1.125)$$

avec

$$\begin{aligned} A_\theta^+ &= -\sin(b) + B\tau \cos(b) \\ &\quad + \frac{1}{1 - \alpha_0 \alpha_1 e^{-\chi}} (\sin(b)(1 + \alpha_0 e^{-2\chi}) + B\tau \cos(b)(\alpha_0 e^{-2\chi} - 1) + B\tau(1 - \alpha_0)e^{-\chi}) \end{aligned} \quad (1.126)$$

et

$$\begin{aligned} A_z^+ &= -B\tau \sin(b) - \cos(b) \\ &\quad + \frac{1}{1 - \alpha_0 \alpha_1 e^{-\chi}} (B\tau \sin(b)(1 + \alpha_0 e^{-2\chi}) + \cos(b)(1 - \alpha_0 e^{-2\chi}) + (\alpha_0 - 1)e^{-\chi}) \end{aligned} \quad (1.127)$$

Pour $\sigma_r = -1$ la solution vaut :

$$\begin{aligned} \bar{D}(r, \sigma_r = -1) &= \frac{\tau}{1 + (B\tau)^2} \left[\bar{\omega}_\theta \left\{ A_\theta^- e^{+\chi r} - \sin(br) - B\tau \cos(br) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \bar{\omega}_z \left\{ A_z^- e^{+\chi r} - B\tau \sin(br) + \cos(br) \right\} \right] \end{aligned} \quad (1.128)$$

avec

$$\begin{aligned} A_\theta^- &= B\tau \\ &+ \frac{1}{1-\alpha_0\alpha_1 e^{-\chi}} (\sin(b)(1+\alpha_1)e^{-\chi} + B\tau \cos(b)(1-\alpha_1)e^{-\chi} + B\tau(\alpha_1 e^{-2\chi} - 1)) \end{aligned} \quad (1.129)$$

et

$$\begin{aligned} A_z^- &= -1 \\ &+ \frac{1}{1-\alpha_0\alpha_1 e^{-\chi}} (B\tau \sin(b)(1+\alpha_1)e^{-\chi} + \cos(b)(\alpha_1 - 1)e^{-\chi} + 1 - \alpha_1 e^{-2\chi}), \end{aligned} \quad (1.130)$$

Démonstration : Pour prouver la proposition nous allons construire une solution de (1.47,1.48). Nous finirons la démonstration avec les expressions (1.125) et (1.128), qui suffisent à définir une solution.

Dans la suite, nous remplaçons $B^\eta(r, z)$ par $B(0, z)$, que nous notons $B(z)$ ³. $D^B(r, \omega)$ est solution de

$$\begin{aligned} u\omega_r \frac{\partial D^B}{\partial r} + B \left(-\omega_z \frac{\partial D^B}{\partial \omega_\theta} + \omega_\theta \frac{\partial D^B}{\partial \omega_z} \right) - \frac{[D^B] - D^B}{\tau} &= \omega_z \\ \mathcal{B}_i D^B(z, v) &= 0. \end{aligned}$$

En introduisant le changement de variables :

$$\begin{cases} \bar{\omega}_\theta = \omega_\theta \cos(br) + \omega_z \sin(br) \\ \bar{\omega}_z = -\omega_\theta \sin(br) + \omega_z \cos(br) \\ \bar{D}(\bar{\omega}_\theta, \bar{\omega}_z) = D^B(\omega_\theta, \omega_z) \end{cases} \quad (1.131)$$

avec

$$b = \frac{B}{u\omega_r} = \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon\omega_r}},$$

on a à résoudre le problème suivant sur $\bar{D}(r, \sigma_r, \bar{\omega}) = D^B(r, \sigma_r, \omega)$:

$$\begin{cases} u\omega_r \frac{\partial \bar{D}}{\partial r} - \frac{[\bar{D}] - \bar{D}}{\tau} = \bar{\omega}_\theta \sin(br) + \bar{\omega}_z \cos(br) \\ \mathcal{B}_i D^B(z, v) = 0 \end{cases} \quad (1.132)$$

Tel quel, ce système est difficile à résoudre analytiquement. Afin de rendre possible la résolution analytique, on postule, ce qu'on vérifiera *a posteriori*, que $[\bar{D}] = 0$.

Forme de la solution

On définit

$$K_\omega(r) = \bar{\omega}_\theta \sin(br) + \bar{\omega}_z \cos(br)$$

³Cette valeur peut être vue comme l'ordre dominant du développement de $B^\eta(r, z)$ par rapport à η

et on rappelle que

$$b = \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon\omega_r}} \text{ soit } u\omega_r = \sqrt{2\varepsilon}\omega_r = \frac{B}{b}.$$

La première équation de (1.132) devient

$$\frac{\partial \bar{D}}{\partial r} = -\chi \bar{D} + \frac{b}{B} K_\omega(r). \quad (1.133)$$

avec

$$\chi = \frac{b}{B\tau}$$

Puisque b, B , et τ ne dépendent pas de r ($B(z)$ étant fixé à $B^0(0, z)$), (1.133) se résout comme une équation différentielle ordinaire dont la solution s'écrit sous la forme :

$$\bar{D}(r, \bar{\omega}) = \bar{D}(0, \bar{\omega})e^{-\chi r} + \frac{b}{B} \int_0^r e^{+\chi s} K_\omega(s) ds \quad (1.134)$$

ou bien

$$\bar{D}(r, \bar{\omega}) = \bar{D}(1, \bar{\omega})e^{-\chi(r-1)} - e^{-\chi r} \frac{b}{B} \int_r^1 e^{+\chi s} K_\omega(s) ds \quad (1.135)$$

Dans ces expressions, les deux intégrales ne présentent pas de difficulté et nous trouvons :

$$\begin{aligned} \bar{D}(r, \sigma_r) &= \bar{D}(0, \sigma_r)e^{-\chi r} \\ &+ \frac{1}{1+(B\tau)^2} \left[\bar{\omega}_\theta \{ \tau \sin(br) - B\tau^2 \cos(br) + B\tau^2 e^{-\chi r} \} \right. \\ &\quad \left. + \bar{\omega}_z \{ B\tau^2 \sin(br) + \tau \cos(br) - \tau e^{-\chi r} \} \right] \end{aligned} \quad (1.136)$$

et

$$\begin{aligned} \bar{D}(r, \sigma_r) &= \bar{D}(1, \sigma_r)e^{-\chi(r-1)} \\ &- \frac{1}{1+(B\tau)^2} \left[\bar{\omega}_\theta \left\{ -\tau \sin(br) + B\tau^2 \cos(br) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + e^{-\chi(r-1)} (\tau \sin(b) - B\tau^2 \cos(b)) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \bar{\omega}_z \left\{ -B\tau^2 \sin(br) - \tau \cos(br) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + e^{-\chi(r-1)} (B\tau^2 \sin(b) + \tau \cos(b)) \right\} \right] \end{aligned} \quad (1.137)$$

Calcul de $\bar{D}(0, \sigma_r)$ et $\bar{D}(1, \sigma_r)$

Il nous reste à déterminer les valeurs $\bar{D}(0, \sigma_r)$ et $\bar{D}(1, \sigma_r)$. Nous pouvons le faire en utilisant les conditions aux limites de façon à former un système linéaire où les inconnues seront $\bar{D}(0, \sigma_r = \pm 1)$ et $\bar{D}(1, \sigma_r = \pm 1)$, d'où nous tirerons $D(1, +1)$ et $D(0, -1)$. Ceci suffit à donner une expression à D pour tout t et tout σ_r . Nous allons alors manipuler des expressions où le signe de b sera celui de ω_r . Aussi, pour ne pas avoir à distinguer

les termes selon le signe de b nous ramenons toutes les occurrences de b à $\tilde{b} = |b|$. De même, au lieu de $\chi = b/B\tau$ nous parlerons de $\tilde{\chi} = \tilde{b}/B\tau$.

A l'aide de cette notation, l'évaluation des expressions (1.136) et (1.137) aux bords pour $\sigma_r = \pm 1$ donne :

$$\begin{aligned}\bar{D}(r = 1, \sigma_r = +1) &= \bar{D}(0, +1)e^{-\tilde{\chi}} \\ &\quad + \frac{1}{1+(B\tau)^2} \left[\bar{\omega}_\theta \left\{ \tau \sin(\tilde{b}) - B\tau^2 \cos(\tilde{b}) + B\tau^2 e^{-\tilde{\chi}} \right\} \right. \\ &\quad \left. + \bar{\omega}_z \left\{ B\tau^2 \sin(\tilde{b}) + \tau \cos(\tilde{b}) - \tau e^{-\tilde{\chi}} \right\} \right]\end{aligned}\quad (1.138)$$

et en tenant compte du fait que lorsque $\sigma_r = -1$, $\chi = -\tilde{\chi}$ et $b = -\tilde{b}$:

$$\begin{aligned}\bar{D}(r = 0, \sigma_r = -1) &= \bar{D}(1, -1)e^{-\tilde{\chi}} \\ &\quad - \frac{1}{1+(B\tau)^2} \left[\bar{\omega}_\theta \left\{ B\tau^2 + e^{-\tilde{\chi}} \left(-\tau \sin(\tilde{b}) - B\tau^2 \cos(\tilde{b}) \right) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \bar{\omega}_z \left\{ -\tau + e^{-\tilde{\chi}} \left(-B\tau^2 \sin(\tilde{b}) + \tau \cos(\tilde{b}) \right) \right\} \right]\end{aligned}\quad (1.139)$$

Dans un souci de simplicité nous omettrons désormais les tilda :

$$b = \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon}|\omega_r|} \text{ et } \chi = \frac{b}{B\tau}.$$

Par ailleurs, les conditions aux limites nous donnent une relation entre une donnée sortante et une donnée entrante :

$$\bar{D}(r = 1, \sigma_r = -1) = \alpha_1 \bar{D}(1, +1) + (1 - \alpha_1) \frac{\phi_1^-}{\pi} \quad (1.140)$$

$$\bar{D}(r = 0, \sigma_r = +1) = \alpha_0 \bar{D}(0, -1) + (1 - \alpha_0) \frac{\phi_0^+}{\pi} \quad (1.141)$$

où, d'après (1.7) et (1.124), pour $i = 0, 1$ et $\sigma_0 = -1, \sigma_1 = +1$:

$$\begin{aligned}\phi_i^+ &= \int_{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r > 0} D(r = i, \sigma_r = \sigma_i) |\omega_r| d\omega \\ &= \int_{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r > 0} D(r = i, \sigma_r = \sigma_i) |\omega_r| \frac{d\omega_\theta d\omega_z}{|\omega_r|} \\ &= \int_{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r > 0} D(r = i, \sigma_r = \sigma_i) d\omega_\theta d\omega_z\end{aligned}$$

et avec le changement de variables (1.131) :

$$\phi_i^+ = \int_{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r > 0} \bar{D}(r = i, \sigma_r = \sigma_i) d\bar{\omega}_\theta d\bar{\omega}_z. \quad (1.142)$$

De la même façon :

$$\phi_i^- = \int_{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r < 0} \bar{D}(r = i, \sigma_r = \sigma_i) d\bar{\omega}_\theta d\bar{\omega}_z. \quad (1.143)$$

Prouvons le

Lemme 7 ϕ_i^+ et ϕ_i^- définis par (1.142) et (1.143) sont nuls pour $i = 0, 1$.

Preuve : Remarquons que (1.132) implique que, en multipliant $\mathcal{B}_i D^B = 0$ par $|\omega_r|$ et en intégrant sur $\{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r > 0\}$:

$$\phi_i^- = \alpha_i \phi_i^+ + (1 - \alpha_i) \frac{\phi_i^+}{\pi} \int_{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r > 0} |\omega_r| d\omega$$

et donc, avec $\int_{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r > 0} |\omega_r| d\omega = \pi$:

$$\phi_i^- = \phi_i^+, \quad \text{pour } i=0,1. \quad (1.144)$$

Par ailleurs, reprenons (1.138) et (1.139) et notons ψ_0 et ψ_1 :

$$\begin{aligned} \bar{D}(r = 1, \sigma_r = +1) &= \bar{D}(0, +1) e^{-\tilde{\chi}} + \psi_0(r = 1, \sigma_r = +1) \\ \bar{D}(r = 0, \sigma_r = -1) &= \bar{D}(1, -1) e^{-\tilde{\chi}} + \psi_1(r = 0, \sigma_r = -1). \end{aligned}$$

Puisque $\omega_\theta \mapsto b$ et $\omega_z \mapsto b$ sont paires, et que ψ_0 et ψ_1 sont de ce fait la somme de deux fonctions impaires par rapport à (respectivement) ω_θ et ω_z , alors :

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r > 0} \psi_0(r = 1, \sigma_r = +1) d\omega_\theta d\omega_z &= 0 \\ \int_{\mathbb{S}^2, \sigma_i \omega_r > 0} \psi_1(r = 0, \sigma_r = -1) d\omega_\theta d\omega_z &= 0. \end{aligned}$$

Ainsi, en intégrant (1.140) et (1.141) selon (1.142) et (1.143) et en utilisant $\chi > 0$:

$$\begin{aligned} \phi_1^+ &= \int_{\mathbb{S}^2, \omega_r > 0} e^{-\chi} \bar{D}(r = 0, \sigma_r = +1) d\omega_\theta d\omega_z \leq \phi_0^- \\ \phi_0^+ &= \int_{\mathbb{S}^2, \omega_r > 0} e^{-\chi} \bar{D}(r = 1, \sigma_r = -1) d\omega_\theta d\omega_z \leq \phi_1^- \end{aligned}$$

Or d'après (1.144), on doit avoir $\phi_1^+ = \phi_0^- = \phi_0^+ = \phi_1^-$ et la condition pour avoir $\phi_1^+ = \phi_0^-$ et $\phi_0^+ = \phi_1^-$ est que ces quantités soient nulles, ce qui termine la démonstration du lemme.

Grâce au résultat du lemme, les équations (1.138), (1.139), (1.140) et (1.141) forment un système linéaire dont on peut tirer $\bar{D}(r = 0, \sigma_r = -1)$ et $\bar{D}(r = 1, \sigma_r = +1)$:

$$\begin{aligned} \bar{D}(0, -1) &= \frac{1}{1 - \alpha_0 \alpha_1 e^{-\chi}} \frac{\tau}{1 + (B\tau)^2} \left[\bar{\omega}_\theta \left\{ \sin(b)(1 + \alpha_1)e^{-\chi} + B\tau \cos(b)(1 - \alpha_1)e^{-\chi} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + B\tau(\alpha_1 e^{-2\chi} - 1) \right\} \right. \\ &\quad \left. + \bar{\omega}_z \left\{ B\tau \sin(b)(1 + \alpha_1)e^{-\chi} + \cos(b)(\alpha_1 - 1)e^{-\chi} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (1 - \alpha_1 e^{-2\chi}) \right\} \right] \end{aligned} \quad (1.145)$$

et

$$\begin{aligned} \bar{D}(1, +1) = & \frac{1}{1-\alpha_0\alpha_1 e^{-\chi}} \frac{\tau}{1+(B\tau)^2} \left[\bar{\omega}_\theta \left\{ \sin(b)(1+\alpha_0 e^{-2\chi}) + B\tau \cos(b)(\alpha_0 e^{-2\chi} - 1) \right. \right. \\ & \left. \left. + B\tau(1-\alpha_0)e^{-\chi} \right\} \right. \\ & \left. + \bar{\omega}_z \left\{ B\tau \sin(b)(1+\alpha_0 e^{-2\chi}) + \cos(b)(1-\alpha_0 e^{-2\chi}) \right. \right. \\ & \left. \left. + (\alpha_0 - 1)e^{-\chi} \right\} \right] \end{aligned} \quad (1.146)$$

Expression finale

En substituant dans (1.136) on obtient finalement l'expression (1.125) de la proposition. Avec l'expression (1.137), on obtient (1.128) de la proposition, ce qui termine la démonstration de la proposition.

Le résultat de la proposition suffit pour le calcul de \bar{D} , puisque nous avons au moins une expression pour chacun des σ_r , pour tout $r \in [0, 1]$ et $\bar{\omega} \in \mathbb{S}^2$. Calculons à présent le coefficient de diffusion défini par (1.52).

1.5.2 Calcul de l'intégrale de D^B

Dans cette section, nous parvenons à une expression analytique du coefficient de diffusion. Prouvons la

Proposition 8 *En déduisant D^B de (1.125) et (1.128), le coefficient de diffusion admet l'expression analytique :*

$$\begin{aligned} \mathbb{D} &= \frac{(2\epsilon)^{3/2}\tau}{3(1+(B\tau)^2)} + \left(\frac{B\tau}{1+(B\tau)^2} \right)^2 \cdot \frac{\epsilon^2}{B^2} \cdot I_1 \\ \text{avec } I_1 &= \int_0^1 (A_\theta^+ B_\theta^+ + A_z^+ B_z^+ + A_\theta^- B_\theta^- + A_z^- B_z^-) (1-w^2) dw. \end{aligned} \quad (1.147)$$

où $A_{\theta,z}^\pm$ et $B_{\theta,z}^\pm$ sont données en (1.126), (1.127), (1.129), (1.130) et (1.155).

Démonstration : Par définition, le coefficient de diffusion vaut :

$$\begin{aligned} \mathbb{D}(z, \epsilon) &= \frac{(2\epsilon)^{3/2}}{4\pi} I \\ \text{avec} \quad I &= \sum_{\sigma_r=\pm 1} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \sigma_r \omega_r > 0} D^B(r, \sigma_r, \omega) \omega_z d\omega dr \\ &= \sum_{\sigma_r=\pm 1} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \sigma_r \omega_r > 0} D^B(r, \sigma_r, \omega) \omega_z \frac{d\omega_\theta d\omega_z}{|\omega_r|} dr. \end{aligned}$$

En rappelant le changement de variables (1.131) de Jacobien égal à 1,

$$I = \sum_{\sigma_r=\pm 1} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \sigma_r \omega_r > 0} \bar{D}(r, \sigma_r, \bar{\omega}) (\bar{\omega}_\theta \sin(br) + \bar{\omega}_z \cos(br)) \frac{d\bar{\omega}_\theta d\bar{\omega}_z}{|\omega_r|} dr,$$

et en utilisant $\tilde{b} = |b|$,

$$\begin{aligned} I &= \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \omega_r > 0} \bar{D}(r, +1, \bar{\omega}) \left(\bar{\omega}_\theta \sin(\tilde{b}r) + \bar{\omega}_z \cos(\tilde{b}r) \right) \frac{d\bar{\omega}_\theta d\bar{\omega}_z}{|\omega_r|} dr \\ &+ \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \omega_r < 0} \bar{D}(r, -1, \bar{\omega}) \left(-\bar{\omega}_\theta \sin(\tilde{b}r) + \bar{\omega}_z \cos(\tilde{b}r) \right) \frac{d\bar{\omega}_\theta d\bar{\omega}_z}{|\omega_r|} dr. \end{aligned} \quad (1.148)$$

De nouveau, nous omettrons dans la suite du calcul les tilde : $b = \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon}|\omega_r|}$.

Avec (1.125) et (1.128) nous avons obtenu $\bar{D}(r, \sigma_r, \bar{\omega})$ sous la forme d'une combinaison de $\bar{\omega}_\theta$ et $\bar{\omega}_z$. Les facteurs en jeu sont des fonctions ne dépendant de $\bar{\omega}_\theta$ et $\bar{\omega}_z$ que par l'intermédiaire de $|\omega_r|$. Or $\bar{\omega}_\theta \mapsto |\omega_r|$ est paire (tout comme $\bar{\omega}_z \mapsto |\omega_r|$), de sorte que l'on élimine dans l'intégrale le terme en facteur de $\bar{\omega}_\theta \bar{\omega}_z$.

Il nous reste :

$$\begin{aligned} \frac{1+(B\tau)^2}{\tau} I &= \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \omega_r > 0} \left\{ \bar{\omega}_\theta^2 [A_\theta^+ e^{-\chi(r-1)} + \sin(br) - B\tau \cos(br)] \sin(br) \right. \\ &\quad \left. + \bar{\omega}_z^2 [A_z^+ e^{-\chi(r-1)} + B\tau \sin(br) + \cos(br)] \cos(br) \right\} \frac{d\bar{\omega}_\theta d\bar{\omega}_z}{|\omega_r|} dr \\ &+ \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \omega_r < 0} \left\{ \bar{\omega}_\theta^2 [A_\theta^- e^{\chi r} - \sin(br) - B\tau \cos(br)] (-\sin(br)) \right. \\ &\quad \left. + \bar{\omega}_z^2 [A_z^- e^{\chi r} - B\tau \sin(br) + \cos(br)] \cos(br) \right\} \frac{d\bar{\omega}_\theta d\bar{\omega}_z}{|\omega_r|} dr. \end{aligned} \quad (1.149)$$

Par passage en coordonnées polaires :

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_\theta &= \rho \cos \phi \\ \bar{\omega}_z &= \rho \sin \phi \end{aligned}$$

et après le changement de variables :

$$w = \sqrt{1 - \rho^2}, \quad (1.150)$$

en remarquant que

$$\begin{aligned} |\omega_r| &= \sqrt{1 - \omega_\theta^2 - \omega_z^2} \\ &= \sqrt{1 - \bar{\omega}_\theta^2 - \bar{\omega}_z^2} \\ &= w, \end{aligned} \quad (1.151)$$

on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{1+(B\tau)^2}{\tau} I &= \pi \int_0^1 \int_0^1 \left\{ [A_\theta^+ e^{-\chi(r-1)} + \sin(br) - B\tau \cos(br)] \sin(br) \right. \\ &\quad + [A_z^+ e^{-\chi(r-1)} + B\tau \sin(br) + \cos(br)] \cos(br) \\ &\quad + [A_\theta^- e^{\chi r} - \sin(br) - B\tau \cos(br)] (-\sin(br)) \\ &\quad \left. + [A_z^- e^{\chi r} - B\tau \sin(br) + \cos(br)] \cos(br) \right\} (1 - w^2) dw dr, \end{aligned} \quad (1.152)$$

ou encore, en permutant les intégrations en r et w et en identifiant les termes qui se compensent :

$$\begin{aligned} \frac{1+(B\tau)^2}{\pi\tau} I &= \int_0^1 \int_0^1 \left\{ A_\theta^+ e^{-\chi(r-1)} \sin(br) \right. \\ &\quad + A_z^+ e^{-\chi(r-1)} \cos(br) \\ &\quad - A_\theta^- e^{\chi r} \sin(br) \\ &\quad + A_z^- e^{\chi r} \cos(br) \\ &\quad \left. + 2 \right\} dr (1-w^2) dw. \end{aligned} \quad (1.153)$$

Les facteurs A_θ^\pm et A_z^\pm ne dépendent pas de la variable r . Nous pouvons de ce fait procéder explicitement à l'intégration en r , et nous obtenons :

$$\begin{aligned} e^\chi \int_0^1 e^{-\chi r} \sin(br) dr &= e^\chi \mathcal{I}m \int_0^1 e^{(-\chi+ib)r} dr \\ &= \frac{B\tau}{1+(B\tau)^2} \frac{1}{b} (-\sin(b) - B\tau \cos(b) + B\tau e^\chi) \\ \\ e^\chi \int_0^1 e^{-\chi r} \cos(br) dr &= e^\chi \mathcal{R}e \int_0^1 e^{(-\chi+ib)r} dr \\ &= \frac{B\tau}{1+(B\tau)^2} \frac{1}{b} (B\tau \sin(b) - \cos(b) + e^\chi) \\ \\ - \int_0^1 e^{\chi r} \sin(br) dr &= -\mathcal{I}m \int_0^1 e^{(\chi+ib)r} dr \\ &= \frac{B\tau}{1+(B\tau)^2} \frac{1}{b} (-e^\chi \sin(b) + B\tau e^\chi \cos(b) - B\tau) \\ \\ \int_0^1 e^{\chi r} \cos(br) dr &= \mathcal{R}e \int_0^1 e^{(\chi+ib)r} dr \\ &= \frac{B\tau}{1+(B\tau)^2} \frac{1}{b} (B\tau e^\chi \sin(b) + e^\chi \cos(b) - 1). \end{aligned} \quad (1.154)$$

Définissons :

$$\begin{aligned} B_\theta^+ &= -\sin(b) - B\tau \cos(b) + B\tau e^\chi \\ B_z^+ &= B\tau \sin(b) - \cos(b) + e^\chi \\ B_\theta^- &= -e^\chi \sin(b) + B\tau e^\chi \cos(b) - B\tau \\ B_z^- &= B\tau e^\chi \sin(b) + e^\chi \cos(b) - 1, \end{aligned} \quad (1.155)$$

de sorte que, avec $\int_0^1 2(1-w^2) dw = 4/3$,

$$\begin{aligned} I &= \frac{4}{3} \left(\frac{\pi\tau}{1+(B\tau)^2} \right) \\ &\quad + \frac{B\tau}{1+(B\tau)^2} \int_0^1 \left(\frac{\pi\tau}{1+(B\tau)^2} \right) \frac{1}{b} (A_\theta^+ B_\theta^+ + \dots + A_z^- B_z^-) (1-w^2) dw \end{aligned}$$

et en se souvenant de la relation $b = \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon} |\omega_r|} = \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon} w}$,

$$I = \frac{4}{3} \left(\frac{\pi\tau}{1+(B\tau)^2} \right)$$

$$+ \frac{\pi B \tau^2}{(1 + (B \tau)^2)^2} \cdot \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon}} \int_0^1 (A_\theta^+ B_\theta^+ + \dots + A_z^- B_z^-) w (1 - w^2) dw,$$

ce qui termine la démonstration.

1.6 Conditions aux limites de Robin

Dans cette section, nous indiquons comment ont été choisies les conditions aux limites (pour le modèle SHE) aux bords⁴ $z = 0$ et $z = l$. Une condition aux limites qui peut sembler naturelle serait d'imposer la distribution des électrons aux bords, en étendant (1.13) :

$$\begin{cases} N(0, \varepsilon, t) = F_0(\varepsilon) \\ N(l, \varepsilon, t) = F_l(\varepsilon) \end{cases} \quad (1.156)$$

Toutefois, cette condition ne prend pas en compte le fait que (1.13) ne spécifie que la partie entrante de la fonction de distribution, alors que $N(z, \varepsilon, t)$, étant la distribution en énergie, ne distingue pas les particules sortantes et les particules entrantes. En d'autres termes, (1.156) suppose que la partie sortante de la fonction de distribution est aussi donnée par (1.13), ce qui est difficile à faire valoir.

Dans le domaine de la simulation numérique [36] comme en théorie du transport ([4] par exemple), de meilleurs résultats sont obtenus en mettant en place des conditions aux limites de Robin :

$$N(0, \varepsilon, t) - \eta \Lambda_0(\varepsilon) \left[\left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N \right] (0, \varepsilon, t) = F_0(\varepsilon) \quad (1.157)$$

$$N(l, \varepsilon, t) + \eta \Lambda_l(\varepsilon) \left[\left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N \right] (l, \varepsilon, t) = F_l(\varepsilon) \quad (1.158)$$

où Λ_0 et Λ_l sont appelées longueurs d'extrapolation.

Dans la suite de cette section, nous décrivons le calcul qui mène à Λ_0 , en suivant [20, 4, 42]. Les résultats obtenus s'étendent alors aisément à Λ_l . Dans un premier temps, nous définissons un problème stationnaire qui permet l'analyse de la condition aux limites au bord $z = 0$, et nous mettons en relief les difficultés à résoudre. Dans un deuxième temps nous construisons un correcteur de couche limite et nous obtenons l'expression de la longueur d'extrapolation $\Lambda_0(\varepsilon)$. Enfin nous proposons une approximation de cette fonction qui permet le calcul de ses valeurs.

1.6.1 Problème stationnaire modèle

Pour éviter le traitement de couches initiales ou de couches mixtes limites/initiales, nous remplaçons le problème transitoire (1.26) par un problème stationnaire (qui peut

⁴Rappelons que lorsque la variable physique \hat{z} varie entre 0 et L , la variable adimensionnée z varie entre 0 et 1.

être vu comme la transformée de Laplace du problème transitoire). Ainsi :

$$\begin{cases} \mu f + \frac{1}{\eta} \mathcal{C} f + \frac{1}{\eta^2} \mathcal{A} f = (\mathbf{Q}_{exc}(f) + \mathbf{Q}_{ion}(f)), & \forall (x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{B}_i f_i(v) = \eta^2 [\mathcal{S}_i f_i^+ - \gamma_i^a f_i^+(v_*)], & \forall (v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0), i = 0, 1 \\ f(z = 0, r, v) = L^b(u), & \forall u > 0, \forall \omega_z > 0 \end{cases} \quad (1.159)$$

où $L^b(u) = F_0(\varepsilon)$ est une donnée aux limites, supposée indépendante de l'angle ω et de la variable spatiale transverse r . On considère alors le développement de Hilbert :

$$f = f_0 + \eta f_1 + \eta^2 f_2 + \eta^3 f_3 + \dots$$

Par une démarche en tous points semblable à la dérivation du modèle de diffusion dans le cas instationnaire, nous sommes conduits à utiliser D^B défini par (1.47, 1.48) et \mathbb{D} défini par (1.52), et nous trouvons que :

$$f_0(x, v) = L(z, u) \quad (1.160)$$

$$f_1(x, v) = - \left[\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L(z, u) \right] D^B(r, \omega; z, u) + L_1(z, u) \quad (1.161)$$

où (d'après la condition d'existence de f_2) $N(z, \varepsilon) = L(z, \varepsilon)$ est soumise à :

$$\sqrt{2\varepsilon} \mu N - \left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) \left[\mathbb{D} \left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N \right] = Q(N) \quad (1.162)$$

et (d'après la condition d'existence de f_3 , que nous ne détaillons pas) $N_1(z, \varepsilon) = L_1(z, u)$ est soumise à :

$$\sqrt{2\varepsilon} \mu N_1 - \left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) \left[\mathbb{D} \left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N_1 \right] = Q(N_1) \quad (1.163)$$

1.6.2 Conditions aux limites d'ordre 1

Définissons $R = f - (f_0 + \eta f_1 + \eta^2 f_2)$ connaissant f_0 et f_1 solutions respectives de (1.29, 1.30) et (1.31, 1.32), avec $L(z, u) = N(z, \varepsilon)$ et $L_1(z, u) = N_1(z, \varepsilon)$ déterminées par (1.162) et (1.163). Alors, on a :

$$\begin{cases} \mu R + \frac{1}{\eta} \mathcal{C} R + \frac{1}{\eta^2} \mathcal{A} R = \mathcal{O}(\eta^2), & \forall (x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{B}_i R_i(v) = \eta^2 [\mathcal{S}_i (f - f_0)_i^+ - \gamma_i^a (f - f_0)_i^+(v_*)], & \forall (v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0), i = 0, 1 \\ R(z = 0, r, v) = L^b(u) - [f_0(z = 0, r, v) + \eta f_1(z = 0, r, v)] + \mathcal{O}(\eta^2), & \forall u > 0, \forall \omega_z > 0 \end{cases} \quad (1.164)$$

Il est possible d'argumenter le fait que les deux premières relations de (1.164) entraînent que R est d'ordre η^2 à l'intérieur du domaine Ω (voir [4, 42]) ; nous l'admettrons ici. Mais sur le bord $z = 0$, il faudrait :

$$(\forall u > 0) \quad L^b(u) - [f_0(z = 0, r, v) + \eta f_1(z = 0, r, v)] = 0$$

Or (1.160) et (1.161) montrent que $f_0(z = 0)$ est une fonction de u mais que $f_1(z = 0)$ n'est pas proportionnelle à une fonction de u uniquement. Ainsi, en imposant :

$$L(z = 0, u) = L^b(u)$$

on a au mieux :

$$R(z = 0, r, v) = \mathcal{O}(\eta)$$

Pour pallier ce problème, nous introduisons un correcteur de couche limite.

1.6.3 Correcteur de couche limite

Puisque f_1 ne permet pas d'avoir des conditions aux limites d'ordre plus élevé que 1, nous introduisons un correcteur de couche limite, c'est-à-dire une perturbation χ_1 de f_1 telle que :

- i) $(f_1 + \chi_1)(z = 0) = 0$ de façon à annuler le terme d'ordre 1 de $R(z = 0)$.
- ii) $\chi_1(z, u)$ soit très petite pour $z \geq z_0$ et $0 < z_0 \ll l$, c'est-à-dire que f_1 soit très peu perturbée hors de la couche limite.
- iii) Que la perturbation ne diminue pas trop l'ordre de R à l'intérieur du domaine, i.e. $\eta \left[\mu \chi_1 + \frac{1}{\eta} \mathcal{C} \chi_1 + \frac{1}{\eta^2} \mathcal{A} \chi_1 \right] \ll \mathcal{O}(\eta)$.

Pour cela nous postulons que la couche limite en $z = 0$ est d'épaisseur η et nous dilatons cet espace de façon que son épaisseur soit d'ordre 1. Posons :

$$\tilde{z} = \frac{z}{\eta}$$

et, puisque $\eta \ll 1$, nous considérons que l'intervalle $z \in [0, L]$ devient le demi-espace $\tilde{z} \in [0, +\infty[$. Notons $\tilde{\Omega} = \{\tilde{x} = (r, \tilde{z}) \in [0, 1] \times [0, +\infty[\}$. Avec cette nouvelle variable d'espace, et en rappelant que

$$\mathcal{C}f = v_z \frac{\partial f}{\partial z} - E_z(z) \frac{\partial f}{\partial v_z} + \frac{v_\theta^2}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial f}{\partial v_r} - \frac{v_r v_\theta}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial f}{\partial v_\theta}$$

i.e. $\mathcal{C}f = \tilde{\mathcal{C}}\tilde{f}$ avec :

$$\tilde{\mathcal{C}}\tilde{f} = \frac{1}{\eta} \left(v_z \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{z}} \right) - E_z(\eta z) \frac{\partial \tilde{f}}{\partial v_z} + \frac{v_\theta^2}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial v_r} - \frac{v_r v_\theta}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial v_\theta}$$

alors nous considérons le problème posé sur le demi-espace $\tilde{z} > 0$:

$$\left\{ \begin{array}{lcl} \mu \tilde{f} + \frac{1}{\eta} \left(-E_z(\eta z) \frac{\partial \tilde{f}}{\partial v_z} + \frac{v_\theta^2}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial v_r} - \frac{v_r v_\theta}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial \tilde{f}}{\partial v_\theta} \right) \\ \quad + \frac{1}{\eta^2} \left(v_z \frac{\partial \tilde{f}}{\partial \tilde{z}} + \mathcal{A} \tilde{f} \right) & = & \left(\mathbf{Q}_{exc}(\tilde{f}) + \mathbf{Q}_{ion}(\tilde{f}) \right), \\ \mathcal{B}_i \tilde{f}_i(v) & = & \eta^2 \left[\mathcal{S}_i \tilde{f}_i^+ - \gamma_i^a \tilde{f}_i^+(v_*) \right], \quad \forall (v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0), i = 0, 1 \\ \tilde{f}(\tilde{z} = 0, r, v) & = & \chi^b(r, u\omega), \quad \forall u > 0, \forall \omega_z > 0 \end{array} \right. \quad (1.165)$$

où tous les opérateurs (réflexion à la paroi, émission secondaire, attachement, collisions en volume) sont pris en $z = \eta \tilde{z}$.

Alors nous considérons le problème de Milne, posé sur le demi-espace $\tilde{z} > 0$, qui consiste à annuler les termes dominants de (1.165) :

$$\left\{ \begin{array}{lcl} v_z \frac{\partial \tilde{\chi}}{\partial \tilde{z}}(\tilde{z}, r, v) + \mathcal{A} \tilde{\chi} & = & 0 \quad \forall (\tilde{x}, v) \in \tilde{\Omega} \\ \mathcal{B}_i \tilde{\chi}_i(v) & = & 0 \quad \forall \tilde{z} > 0, \forall (v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0), i = 0, 1 \\ \tilde{\chi}(\tilde{z} = 0, r, u\omega) & = & \chi^b(r, u\omega), \quad \forall u > 0, \forall \omega_z > 0 \end{array} \right. \quad (1.166)$$

Ce problème est apparu sous de nombreuses formes dans la littérature ([4, 42, 27] par exemple) et nous étendons les résultats obtenus dans chacun de ces cas en adoptant la

Conjecture 1 *Le problème*

$$\begin{aligned} v_z \frac{\partial \tilde{\chi}}{\partial \tilde{z}}(\tilde{z}, r, v) + \mathcal{A} \tilde{\chi} & = 0 \quad \forall (\tilde{x}, v) \in \tilde{\Omega} \times \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{B}_i \tilde{\chi}_i(v) & = 0 \quad \forall \tilde{z} > 0, \forall (v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0), i = 0, 1 \\ \tilde{\chi}(\tilde{z} = 0, r, u\omega) & = \chi^b(r, u\omega), \quad \forall u > 0, \forall \omega_z > 0 \end{aligned}$$

admet une solution bornée unique, qui converge exponentiellement vers une fonction qui ne dépend que de u (notée $\chi^\infty(u)$) lorsque $\tilde{z} \rightarrow +\infty$.

Considérons désormais le correcteur suivant :

$$\chi_1(z, r, u\omega) = (\chi(z, r, u\omega) - \chi^\infty(u)) \left[\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L(z, u) \right]_{z=0} \quad (1.167)$$

en notant $\chi(z, r, u\omega) = \tilde{\chi}(\frac{z}{\eta}, r, u\omega)$, et $\tilde{\chi}$ solution de (1.166) avec

$$\chi^b(r, u\omega) = D^B(z = 0, r, u\omega)$$

1.6.4 Conditions aux limites d'ordre 2

Conditions aux limites de Robin

A l'aide du correcteur défini par (1.167), le reste $R^\chi = f - (f_0 + \eta(f_1 + \chi_1) + \eta^2 f_2)$ satisfait la condition aux limites en $z = 0$:

$$\begin{aligned} R^\chi(z = 0, r, v) &= L^b(u) - f_0(z = 0, r, v) \\ &\quad - \eta [(f_1 + \chi_1)(z = 0, r, v)] + \mathcal{O}(\eta^2) \end{aligned}$$

Or rappelons que $f_0(x, v) = L(z, u)$ et notons que :

$$\begin{aligned} (f_1 + \chi_1)(z = 0, r, v) &= - \left[\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L(z, u) \right]_{z=0} \cdot D^B(r, \omega; z = 0, u) \\ &\quad + L_1(z = 0, u) \\ &\quad + (\chi_b(r, \omega, u) - \chi^\infty(u)) \left[\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L(z, u) \right]_{z=0} \end{aligned}$$

de sorte qu'en imposant :

$$\begin{aligned} L(z = 0, u) &= L^b(u) \\ L_1(z = 0, u) &= \chi^\infty(u) \left[\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) L \right] (z, u) \end{aligned}$$

on obtient $R^\chi(z = 0, r, v) = \mathcal{O}(\eta^2)$. Dans les variables (z, ε) , qui sont les variables que nous utilisons pour le modèle SHE, ces conditions s'écrivent sur les fonctions $N(z, \varepsilon) = L(z, u)$ et $N_1(z, \varepsilon) = L_1(z, u)$:

$$N(z = 0, \varepsilon) = L^b(\sqrt{2\varepsilon}) \quad (1.168)$$

$$N_1(z = 0, \varepsilon) = \chi^\infty(\sqrt{2\varepsilon}) \sqrt{2\varepsilon} \left[\left(\frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N \right] (z, \varepsilon) \quad (1.169)$$

ce qui nous permet d'identifier [4, 14] une quantité appelée *longueur d'extrapolation*, définie par :

$$\Lambda(\varepsilon) = \chi^\infty(\sqrt{2\varepsilon}) \sqrt{2\varepsilon}. \quad (1.170)$$

Posons $N^\eta(z, \varepsilon) = N(z, \varepsilon) + \eta N_1(z, \varepsilon)$. D'après (1.162, 1.163), N^η satisfait :

$$\sqrt{2\varepsilon} \mu N^\eta(z, \varepsilon) - \left(\frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) \left[\mathbb{D} \left(\frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N^\eta \right] (z, \varepsilon) = Q(N^\eta)(z, \varepsilon)$$

A partir de (1.168, 1.169), et d'une démarche analogue pour le bord $z = l$, nous sommes conduits à proposer les conditions aux limites vérifiées par N^η [42], en notant Λ_i la longueur d'extrapolation au bord $z = i$:

$$N^\eta(z = 0, \varepsilon, t) - \eta \Lambda_0(\varepsilon) \left[\left(\frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N^\eta \right] (0, \varepsilon, t) = F_0(\varepsilon) \quad (1.171)$$

$$N^\eta(z = l, \varepsilon, t) + \eta \Lambda_l(\varepsilon) \left[\left(\frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N^\eta \right] (l, \varepsilon, t) = F_l(\varepsilon) \quad (1.172)$$

où $\Lambda_0(\varepsilon)$ et $\Lambda_l(\varepsilon)$ restent à calculer.

Condition aux limites pour $\varepsilon = 0$

Pour compléter l'étude des conditions aux limites à imposer sur le bord de $[0, l]_z \times \mathbb{R}_\varepsilon^+$, il nous reste à examiner le bord $\{z \in [0, l], \varepsilon = 0\}$. D'après (1.147), et puisque B, τ et I_1 ne dépendent pas de ε , on constate que :

$$(\forall z \in [0, l]) \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathbb{D}(z, \varepsilon) = 0.$$

Ainsi, nous considérons que :

$$(\forall z \in [0, l]) \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \mathbb{D}(z, \varepsilon) \left[\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) N \right] (z, \varepsilon) = 0.$$

et en notant :

$$\mathcal{J}(z, \varepsilon) = -\mathbb{D}(z, \varepsilon) \left[\left(u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u} \right) N \right] (z, \varepsilon) \quad (1.173)$$

nous imposerons :

$$(\forall z \in [0, l]) \quad \mathcal{J}(z, \varepsilon = 0) = 0. \quad (1.174)$$

Condition sur le signe de $\Lambda_0(\varepsilon)$ et $\Lambda_l(\varepsilon)$

La résolution de l'équation instationnaire d'inconnue N^η :

$$\sqrt{2\varepsilon} \frac{\partial N^\eta}{\partial t} - \left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) \left[\mathbb{D} \left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N^\eta \right] = Q(N^\eta) \quad (1.175)$$

munie des conditions aux limites en $z = 0$ et $z = l$ (1.171, 1.172) permet d'obtenir une meilleure approximation de la fonction de distribution en énergie [42], et c'est ce problème que nous discréterons. Nous omettrons dans la suite le η et nous noterons $N(z, \varepsilon, t)$ la solution de (1.175, 1.171, 1.172).

Toutefois, nous proposons ici une vérification que les conditions aux limites (1.171, 1.172) conduisent à un problème bien posé. Considérons l'équation, en notant $\tilde{\nabla} = (u \frac{\partial}{\partial z} - E(z) \frac{\partial}{\partial u})$ et où \mathcal{J} est défini en (1.173) :

$$\sqrt{2\varepsilon} \frac{\partial N}{\partial t} + \tilde{\nabla} \mathcal{J} = 0 \quad (1.176)$$

munie des conditions aux limites (1.171, 1.172). En multipliant (1.176) par $N(z, \varepsilon)$ et en intégrant par rapport à z et ε , on a :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{[0, l] \times \mathbb{R}^+} \frac{N^2}{2} \sqrt{2\varepsilon} dz d\varepsilon + \int_{[0, l] \times \mathbb{R}^+} N \tilde{\nabla} \mathcal{J} dz d\varepsilon = 0$$

et en rappelant (1.174), l'intégration par parties donne :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{[0, l] \times \mathbb{R}^+} \frac{N^2}{2} \sqrt{2\varepsilon} dz d\varepsilon - \int_{[0, l] \times \mathbb{R}^+} \mathcal{J} \tilde{\nabla} N dz d\varepsilon \\ + \left(\int_{\mathbb{R}^+} \mathcal{J} N d\varepsilon \right)_{z=l} - \left(\int_{\mathbb{R}^+} \mathcal{J} N d\varepsilon \right)_{z=0} = 0 \end{aligned} \quad (1.177)$$

Les conditions aux limites (1.171,1.172) nous donnent :

$$\begin{aligned} N(z = 0, \varepsilon) &= F_0(\varepsilon) - \frac{\Lambda_0(\varepsilon)}{\mathbb{D}(z = 0, \varepsilon)} \mathcal{J}(z = 0, \varepsilon) \\ N(z = l, \varepsilon) &= F_l(\varepsilon) + \frac{\Lambda_l(\varepsilon)}{\mathbb{D}(z = l, \varepsilon)} \mathcal{J}(z = l, \varepsilon), \end{aligned}$$

de sorte que (1.177) devient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \int_{[0,l] \times \mathbb{R}^+} \frac{N^2}{2} \sqrt{2\varepsilon} dz d\varepsilon + \int_{[0,l] \times \mathbb{R}^+} \mathbb{D} |\tilde{\nabla} N|^2 dz d\varepsilon \\ + \left(\int_{\mathbb{R}^+} \frac{\Lambda_l}{\mathbb{D}} \mathcal{J}^2 d\varepsilon \right)_{z=l} + \left(\int_{\mathbb{R}^+} \frac{\Lambda_0}{\mathbb{D}} \mathcal{J}^2 d\varepsilon \right)_{z=0} = - \int_{\mathbb{R}^+} \mathcal{J}(z = 0, \varepsilon) F_0(\varepsilon) d\varepsilon \\ + \int_{\mathbb{R}^+} \mathcal{J}(z = l, \varepsilon) F_l(\varepsilon) d\varepsilon \end{aligned}$$

Or $(\forall (z, \varepsilon) \in [0, l] \times \mathbb{R}^+) \mathbb{D}(z, \varepsilon) \geq 0$ [18], donc pour que le problème soit bien posé, il suffit que [13] :

$$\begin{cases} (\forall \varepsilon \geq 0) \quad \Lambda_0(\varepsilon) \geq 0 \\ (\forall \varepsilon \geq 0) \quad \Lambda_l(\varepsilon) \geq 0. \end{cases} \quad (1.178)$$

Dans le paragraphe suivant, nous trouvons une approximation des longueurs d'extrapolation Λ_0 et Λ_l et nous vérifions que ces conditions sur leur signe sont vérifiées.

1.6.5 Approximation de la longueur d'extrapolation

Le calcul des longueurs d'extrapolation consiste à résoudre le problème suivant : étant donnée une valeur au bord $\chi_b(r, u\omega)$, peut-on calculer la limite de $\tilde{\chi}$ solution de (1.166) (indépendante de r et ω d'après la conjecture 1) $\chi^\infty(u) = \lim_{\tilde{z} \rightarrow +\infty} \tilde{\chi}(\tilde{z}, r, u\omega)$ sans résoudre (1.166) ?

Dans les cas explorés jusqu'à présent en théorie du transport, il a été possible de donner une bonne approximation de χ^∞ , comme par exemple dans [27, 42]. Pour approcher χ^∞ , remarquons que l'on a la

Proposition 9 *Si $\tilde{\chi}$ est solution de (1.166), alors $\tilde{\chi}$ vérifie*

$$(\forall \tilde{z} > 0) \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \omega_z \chi(r, \tilde{z}, u\omega) d\omega dr = 0$$

La preuve de la proposition est immédiate en utilisant les mêmes arguments que pour la preuve de la relation (1.65). Cette relation signifie que pour la solution χ , le flux total (à travers d'une section $\tilde{z} = Cte$) de particules d'énergie ε est nul. Une approximation classique [27] et dont l'exactitude a été comparée avec des méthodes plus élaborées [42] s'appelle l'approximation de Marshak. Elle consiste à postuler de plus que les flux totaux dans une direction $\omega_z > 0$ et dans l'autre $\omega_z < 0$ ne dépendent pas de \tilde{z} . Pour le

demi-espace $\tilde{z} > 0$, ce postulat s'écrit :

$$(\forall \tilde{z} > 0) \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \pm \omega_z > 0} \omega_z \chi(r, \tilde{z}, u\omega) d\omega dr = \Phi_{\pm}(u)$$

Utilisons cette relation pour déterminer la limite de $\tilde{\chi}$ solution de (1.166), les quantités indiquées par 0 concernant le bord $z = 0$. En prenant $\tilde{z} = 0$ et $\tilde{z} \rightarrow +\infty$, on a :

$$\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \omega_z > 0} \omega_z \chi_0^b(r, u\omega) d\omega dr = \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \omega_z > 0} \omega_z \chi_0^{\infty}(u) d\omega dr$$

donc, en utilisant $\chi_0^b(r, u\omega) = D^B(r, z = 0, u\omega)$, on obtient :

$$\chi_0^{\infty}(u) = \frac{\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \omega_z > 0} \omega_z D^B(r, z = 0, u\omega) d\omega dr}{\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \omega_z > 0} \omega_z d\omega dr}$$

Or (1.149) permet de constater que :

$$\begin{aligned} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \omega_z > 0} \omega_z D^B(r, z = 0, u\omega) d\omega dr &= \frac{1}{2} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \omega_z D^B(r, z = 0, u\omega) d\omega dr \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{4\pi}{(2\varepsilon)^{3/2}} \mathbb{D}(z = 0, \varepsilon) \right) \end{aligned}$$

d'après la définition (1.52). En utilisant $\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2, \omega_z > 0} \omega_z d\omega dr = \pi$, nous obtenons finalement :

$$\chi_0^{\infty}(\sqrt{2\varepsilon}) = \frac{2}{(2\varepsilon)^{3/2}} \mathbb{D}(z = 0, \varepsilon)$$

et

$$\Lambda_0(\varepsilon) = \frac{\mathbb{D}(z = 0, \varepsilon)}{\varepsilon}$$

d'après (1.170).

Similairement, en inversant le signe de ω_z , on obtient :

$$\Lambda_1(\varepsilon) = \frac{\mathbb{D}(z = l, \varepsilon)}{\varepsilon}$$

Remarquons que puisque le coefficient de diffusion \mathbb{D} est positif [18], les longueurs d'extrapolation Λ_i sont positives, et ainsi les conditions (1.178) sont satisfaites.

Les approximations de Λ_0 et Λ_l nous permettent de déterminer les conditions aux limites, pourvu que l'on sache calculer les valeurs du coefficient de diffusion. Le calcul pratique du coefficient de diffusion est l'objet de la section suivante.

1.7 Calcul pratique du coefficient de diffusion

Nous verrons dans la section suivante qu'il faut entre 200 000 et 400 000 mailles pour la discréétisation du modèle SHE. Le coefficient de diffusion est à calculer en chaque des mailles, aussi faut-il proposer une méthode de calcul rapide.

Selon que l'on considère que des collisions en volumes ont lieu ou non, nous sommes confrontés à deux calculs de complexités très différentes. Lorsqu'il n'y a pas de collision en volume, le coefficient de diffusion est donné par [15] :

$$\mathbb{D}(z, \varepsilon) = \frac{\varepsilon^2 \beta}{B^2} \int_0^1 \left(\left(1 - \cos \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon} w} \right)^2 + \frac{\gamma}{\beta} \sin^2 \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon} w} \right) w (1 - w^2) dw , \quad (1.179)$$

avec les facteurs β et γ dépendant des coefficients d'accommodation aux parois γ_0^e et γ_1^e (cf section 1.3) :

$$\gamma(z, \varepsilon) = -\frac{4 - 2(\gamma_0^e + \gamma_1^e) + \gamma_0^e \gamma_1^e}{\gamma_0^e \gamma_1^e - \gamma_0^e - \gamma_1^e}, \quad \beta(z, \varepsilon) = -\frac{\gamma_0^e \gamma_1^e}{\gamma_0^e \gamma_1^e - \gamma_0^e - \gamma_1^e} \quad (1.180)$$

Dans le cas où les collisions en volume sont prises en compte, le coefficient de diffusion vaut, après développement de (1.147) et en notant $\kappa = B\tau$:

$$\mathbb{D}(z, \varepsilon) = \frac{(2\varepsilon)^{3/2} \tau}{3(1 + (B\tau)^2)} + \left(\frac{\kappa^2}{1 + \kappa^2} \right)^2 \cdot \frac{\varepsilon^2}{B^2} \cdot I_2 \quad (1.181)$$

avec

$$\begin{aligned} I_2 = & \gamma_0^e (\kappa^{-2} - 1) F_1 \\ & - 2\gamma_0^e \kappa^{-1} F_2 \\ & + 4(1 + \gamma_1^e)(\gamma_0^e - 1) F_3 \\ & + 2(\kappa^{-2} - 1)(1 - \gamma_0^e)(1 - \gamma_1^e) F_4 \\ & + \gamma_1^e (\kappa^{-2} - 1)(1 - 2\gamma_0^e) F_5 \\ & + \gamma_1^e (\kappa^{-2} - 1) F_6 \\ & + 2\gamma_1^e \kappa^{-1} F_7 \\ & + (\kappa^{-2} - 1)(\gamma_0^e - 2) F_8 \end{aligned}$$

et en définissant $\chi = \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon}}$, $\zeta = \frac{1}{\tau\sqrt{2\varepsilon}}$, et $\alpha = \gamma_0^e \gamma_1^e$, les facteurs F_i sont les intégrales dépendant des trois paramètres (χ, ζ, α) :

$$\begin{aligned} F_1(\chi, \zeta, \alpha) &= \int_0^1 \frac{e^{-\frac{2\zeta}{w}}}{1 - \alpha e^{\frac{-2\zeta}{w}}} \cos \left(\frac{2\chi}{w} \right) w(1 - w^2) dw \\ F_2(\chi, \zeta, \alpha) &= \int_0^1 \frac{e^{-\frac{2\zeta}{w}}}{1 - \alpha e^{\frac{-2\zeta}{w}}} \sin \left(\frac{2\chi}{w} \right) w(1 - w^2) dw \\ F_3(\chi, \zeta, \alpha) &= \int_0^1 \frac{e^{-\frac{\zeta}{w}}}{1 - \alpha e^{\frac{-2\zeta}{w}}} \sin \left(\frac{\chi}{w} \right) w(1 - w^2) dw \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
F_4(\chi, \zeta, \alpha) &= \int_0^1 \frac{e^{-\frac{\zeta}{w}}}{1 - \alpha e^{\frac{-2\zeta}{w}}} \cos\left(\frac{\chi}{w}\right) w(1 - w^2) dw \\
F_5(\chi, \zeta, \alpha) &= \int_0^1 \frac{e^{-\frac{\zeta}{w}}}{1 - \alpha e^{\frac{-2\zeta}{w}}} w(1 - w^2) dw \\
F_6(\chi, \zeta, \alpha) &= \int_0^1 \frac{1}{1 - \alpha e^{\frac{-2\zeta}{w}}} \cos\left(\frac{2\chi}{w}\right) w(1 - w^2) dw \\
F_7(\chi, \zeta, \alpha) &= \int_0^1 \frac{1}{1 - \alpha e^{\frac{-2\zeta}{w}}} \sin\left(\frac{2\chi}{w}\right) w(1 - w^2) dw \\
F_8(\chi, \zeta, \alpha) &= \int_0^1 \frac{1}{1 - \alpha e^{\frac{-2\zeta}{w}}} w(1 - w^2) dw
\end{aligned}$$

Remarque 3 La première formule provient du calcul décrit dans [15], où l'on ne considère pas de collisions en volume. Pour la deuxième formule, le fait que le temps de relaxation τ (c'est-à-dire le temps moyen entre deux collisions) devient grand signifie qu'il y a de moins en moins de collisions en volume. A la limite $\tau \rightarrow +\infty$, on retrouve la première formule et c'est l'un des moyens utilisés pour vérifier les calculs menant à (1.181).

Ces intégrales sont calculables par des formules de quadrature. Le découpage de l'intervalle $w \in [0, 1]$ en de nombreux sous-intervalles et l'utilisation d'une formule de Gauss d'ordre élevé permet d'obtenir une bonne approximation de leur valeur. Toutefois, ce genre de calcul est coûteux, ce qui nous a poussé à rechercher un moyen plus rapide pour calculer les coefficients de diffusion.

1.7.1 Tabulation d'un intégrale dépendant d'un seul paramètre

La tabulation consiste à stocker les résultats de calculs parfois lourds, et à réutiliser ces données autant que possible. Les formules (1.179) et (1.181) peuvent être vues comme des combinaisons de fonctions dont le calcul requiert un grand nombre d'opérations. Dans ce paragraphe nous montrons qu'il est possible de séparer les calculs coûteux et la construction du coefficient de diffusion lorsque le coefficient de diffusion est donné par (1.179). Une démarche similaire peut être suivie pour (1.181) après une analyse asymptotique, que nous décrivons dans le paragraphe suivant.

Considérons la fonction qui apparaît dans (1.179), en notant $\chi = \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon}}$:

$$I(\chi, \gamma, \beta) = \int_0^1 \left(1 - \cos \frac{\chi}{w}\right)^2 w(1 - w^2) dw + \frac{\gamma}{\beta} \int_0^1 \left(\sin^2 \frac{\chi}{w}\right) w(1 - w^2) dw \quad (1.182)$$

C'est une combinaison de fonctions de χ seulement et en pratique il suffit de connaître leurs graphes pour $\chi \in [0, 500]$ (compte tenu de la discréttisation que nous décrirons dans la section suivante, il n'est pas nécessaire de calculer le coefficient de diffusion pour des

valeurs arbitrairement petites de l'énergie, i.e. pour des valeurs arbitrairement grandes de χ).

La tabulation consiste à effectuer les intégrations de ces deux fonctions une seule fois, et à conserver les résultats obtenus. Pour mettre en pratique cette idée, nous avons stocké 1000 valeurs régulièrement espacées sur $[0, 500]$, comme sur la figure 1.6. Ce calcul prend quelques minutes mais il n'est fait qu'une fois. Les valeurs calculées sont stockées dans un fichier, qui est lu à chaque simulation du transport des électrons. Pour chacun des points du maillage, ces valeurs sont interpolées et l'interpolation est reportée dans la formule (1.182). Pour le cas où il n'y a pas de collision en volume, c'est-à-dire lorsque le coefficient de diffusion est donné par (1.179), ce procédé permet de diviser le temps de calcul des coefficients de diffusion par 100.

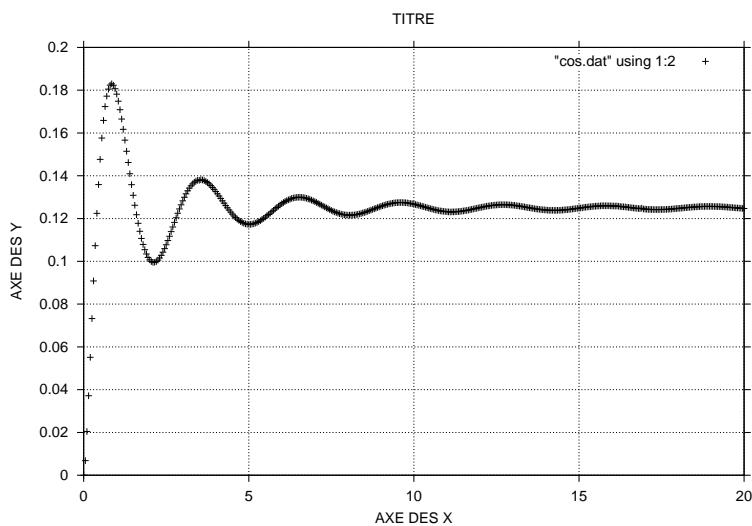


FIG. 1.6 – Tabulation de $\int_0^1 \left(1 - \cos \frac{\chi}{w}\right)^2 w (1 - w^2) dw$ pour $\chi \in [0, 20]$. Au-delà de cet intervalle, les variations sont très faibles.

1.7.2 Réduction du coefficient par passage à la limite

Le calcul du coefficient de diffusion qui prend en compte des collisions en volume est beaucoup plus complexe. Par souci de simplicité, nous ne détaillons la simplification du calcul que sur l'une des fonctions dont $\mathbb{D}(z, \varepsilon)$ est la somme (cf (1.181)).

Contrairement au cas précédent, \mathbb{D} est une combinaison d'intégrales dépendant de trois paramètres, comme par exemple :

$$F_1(\chi, \zeta, \alpha) = \int_0^1 \frac{e^{\frac{-2\zeta}{w}}}{1 - \alpha e^{\frac{-2\zeta}{w}}} \cos\left(\frac{2\chi}{w}\right) w (1 - w^2) dw \quad (1.183)$$

Notre souhait initial était d'appliquer la même démarche en trois dimensions : la construction d'un tableau à trois entrées permettrait d'interpoler les valeurs des intégrales. Or le

calcul direct par des formules de quadrature permet de connaître le graphe de F_1 en fonction des trois variables, ce qui nous a indiqué qu'il était nécessaire d'utiliser un maillage fin pour capturer les variations de cette fonction. Même en nous contentant de 10^3 mailles pour chacune des trois variables, nous serions conduits à un tableau de valeurs contenant 10^9 d'éléments, ce qui rend la démarche déraisonnable tant en espace disque qu'en temps nécessaire au transfert des données. Un maillage non cartésien est possible mais nettement plus complexe à mettre en oeuvre, c'est pourquoi nous avons voulu réduire la complexité du calcul.

Asymptotique $\tau \rightarrow +\infty$

Nous avons examiné la possibilité d'approcher $F_1(\chi, \zeta, \alpha)$ (par exemple) par une combinaison d'intégrales qui ne dépendraient plus que d'un seul paramètre. Des arguments de physique invitent à comparer le coefficient de diffusion avec sa limite quand le temps de relaxation τ tend vers ∞ , c'est-à-dire quand les collisions sont peu nombreuses. Si on reprend (1.183), on peut utiliser le développement limité pour $\zeta = \frac{1}{\tau\sqrt{2\varepsilon}}$ au voisinage de 0 :

$$e^{\frac{-2\zeta}{w}} = 1 - \frac{2\zeta}{w} + \mathcal{O}(\zeta^2),$$

et alors on obtient à l'ordre 1, pour $\alpha \neq 1$ (nous traitons le cas $\alpha = 1$ plus loin) :

$$\frac{e^{\frac{-2\zeta}{w}}}{1 - \alpha e^{\frac{-2\zeta}{w}}} = \frac{1}{1 - \alpha} \left(1 - \frac{2\zeta}{w} \frac{1}{1 - \alpha} \right) + \mathcal{O}(\zeta^2),$$

de sorte que (1.183) devient, en remarquant que $\frac{1}{w}$ se simplifie avec $w(1 - w^2)$:

$$F_1(\chi, \zeta, \alpha) \approx \frac{1}{1 - \alpha} \left(C_1(2\chi) - \frac{2\zeta}{1 - \alpha} C_0(2\chi) \right)$$

avec

$$\begin{aligned} C_0(2\chi) &= \int_0^1 \cos\left(\frac{2\chi}{w}\right) (1 - w^2) dw \\ C_1(2\chi) &= \int_0^1 \cos\left(\frac{2\chi}{w}\right) w (1 - w^2) dw \end{aligned}$$

Ainsi, pour $\alpha \neq 1$ et lorsque χ est suffisamment petit, $F_1(\chi, \zeta, \alpha)$ peut être approximée par une combinaison d'intégrales ne dépendant que d'une seule variable, que nous avons tabulées exactement de la même façon que dans le paragraphe précédent.

D'une façon très similaire, lorsque $\alpha = 1$, on a l'équivalent quand $\zeta \rightarrow 0$:

$$\frac{e^{\frac{-2\zeta}{w}}}{1 - e^{\frac{-2\zeta}{w}}} \sim \frac{w}{2\zeta}$$

et ainsi dans ce cas :

$$F_1(\chi, \zeta, 1) \approx \frac{1}{2\zeta} C_2(2\chi)$$

avec

$$C_2(2\chi) = \int_0^1 \cos\left(\frac{2\chi}{w}\right) w^2 (1 - w^2) dw$$

La démarche que nous venons de décrire s'applique sur toutes les intégrales dont la somme permet de calculer le coefficient de diffusion. Nous obtenons finalement une combinaison des cinq fonctions suivantes (nous omettons de reporter l'approximation du coefficient de diffusion que nous obtenons, par souci de simplicité) qui ne dépendent que d'une seule variable (χ) :

$$\begin{aligned} C_0(\chi) &= \int_0^1 \cos\left(\frac{\chi}{w}\right) (1 - w^2) dw \\ C_1(\chi) &= \int_0^1 \cos\left(\frac{\chi}{w}\right) w (1 - w^2) dw \\ C_2(\chi) &= \int_0^1 \cos\left(\frac{\chi}{w}\right) w^2 (1 - w^2) dw \\ S_1(\chi) &= \int_0^1 \sin\left(\frac{\chi}{w}\right) w (1 - w^2) dw \\ S_2(\chi) &= \int_0^1 \sin\left(\frac{\chi}{w}\right) w^2 (1 - w^2) dw \end{aligned}$$

dont la tabulation est stockée de la même façon que dans le paragraphe précédent.

Critère de validité de l'asymptotique

L'exécution du code SHE dans de nombreux cas différents nous a permis de constater que pour des valeurs typiques des autres paramètres, les valeurs du coefficient et de la limite sont très proches pour ε suffisamment grand. Ici se pose la question du choix d'un critère pour utiliser l'asymptote à la place de la fonction elle-même, en tenant compte du fait qu'il n'est pas utile de garantir que les deux fonctions sont proches sur la totalité du pavé où varient les trois paramètres. En effet, certains triplets n'apparaîtront jamais dans les simulations de SPT. En pratique, le critère $\varepsilon > \varepsilon_g + 20eV$ où ε_g est le potentiel de gaine s'est révélé être un bon critère pour garantir une erreur négligeable pour toutes les valeurs rencontrées dans les simulations, ce que nous avons vérifié (en comparant l'asymptote et le coefficient de diffusion calculé à l'aide de formules de quadrature) au cours de nombreuses exécutions avant de l'adopter définitivement.

Avec les éléments développés dans ce paragraphe, nous pouvons résumer le calcul du coefficient de diffusion dans le cas général :

- Si on ne simule pas de collision en volume, alors on utilise la tabulation de $\chi \mapsto \int_0^1 (1 - \cos \frac{\chi}{w})^2 w (1 - w^2) dw$ et de $\chi \mapsto \int_0^1 (\sin^2 \frac{\chi}{w}) w (1 - w^2) dw$.
- Si on simule les collisions en volume, alors :
 - si $\varepsilon > \varepsilon_g + 20 \text{ eV}$ alors on utilise les tabulations de S_1, S_2, C_0, C_1, C_2 ,
 - sinon on utilise une formule de quadrature.

1.7.3 Alternative aux formules de quadrature

Pour un cas typique où $\varepsilon_g = 10 \text{ eV}$, le critère $\varepsilon > \varepsilon_g + 20 \text{ eV}$ couvre environ 9/10 du domaine et les points restants doivent être traités avec des formules de quadrature. Bien qu'ils ne représentent qu'une petite partie du domaine, leur calcul nécessite environ 400 fois plus de temps⁵ et représente donc la majeure partie du temps de calcul des coefficients de diffusion.

Puisque le calcul des coefficients de diffusion occupe près de 20 % du temps d'exécution d'une simulation dans un cas typique, une amélioration sur ce calcul amènera un gain substantiel sur le temps global. Qui plus est, le critère $\varepsilon > \varepsilon_g + 20 \text{ eV}$ indique que le temps de calcul augmentera lorsque le ε_g augmente. Certaines simulations requièrent des potentiels de l'ordre de 100 eV et le temps d'exécution devient alors beaucoup plus long (plus de dix minutes).

Une alternative possible consiste à transformer les intégrales pour trouver une forme équivalente où n'interviennent que des fonctions dont les valeurs sont rapides à calculer. Dans le cas où il n'y a pas de collisions en volume, ceci est possible ; des intégrations par parties mènent à une expression (que nous omettons) mettant en jeu les fonctions sinus, cosinus, et cosinus intégral $C_i(a) = \int_a^\infty \frac{\cos(t)}{t} dt$, dont le calcul efficace est disponible dans des bibliothèques. Ceci permet de gagner un facteur 20 par rapport à l'intégration par le biais de formules de quadrature.

Lorsque les collisions en volume interviennent, les fonctions à intégrer sont plus complexes et cette démarche échoue. L'étude de procédés algébriques différents pour transformer ces intégrales est encourageante et sera poursuivie si le besoin de gain en rapidité d'exécution se fait sentir.

1.8 Discrétisation du modèle SHE

Nous présentons ici la discrétisation du modèle SHE pour aboutir à la résolution d'une suite de systèmes linéaires. Dans un premier temps nous explicitons le problème aux limites que nous souhaitons résoudre, compte tenu des données physiques. Dans un deuxième temps, nous décrivons succinctement la discrétisation que nous avons utilisée afin de donner une solution numérique à ce problème.

⁵Cette information est obtenue en analysant l'exécution du programme.

1.8.1 Problème à résoudre

Rappelons que la fonction de distribution en énergie $N(z, W)$ est une fonction de la coordonnée axiale $z \in [0, l]$ et de l'énergie totale $W = \varepsilon - \phi(z)$. La connaissance du champ électrique, notamment, est nécessaire pour déterminer l'ensemble, que nous notons \mathcal{D} , des (z, W) sur lesquels la fonction de distribution n'est pas nulle. Nous précisons les champs électriques que nous avons considérés, ainsi que les ordres de grandeur des données du modèle. Nous en déduisons la géométrie du domaine \mathcal{D} . Enfin nous proposons un résumé des équations à résoudre.

Données physiques

Nous rappelons que $\hat{z} \in [0, L]$ désigne la coordonnée axiale et que z est la coordonnée axiale adimensionnée. Sauf ambiguïté, nous noterons indifféremment les fonctions de z et \hat{z} .

Longueurs La longueur de la cavité est celle du SPT100 ($L = 4 \text{ cm}$). Les rayons des cylindres délimitant la cavité mesurent $R_0 = 3 \text{ cm}$ pour le cylindre interne et $R_1 = 5 \text{ cm}$ pour le cylindre externe.

Champ électrique Le potentiel appliqué entre la cathode et l'anode vaut 300 V dans la plupart de nos calculs. Suite aux simulations du modèle auto-cohérent développé au CPAT [24, 6], le champ électrique a la forme donnée par la figure (1.8). Le champ est constant jusqu'à un certain point sur l'axe z_1 , puis il croît linéairement jusqu'à une valeur qui se déduit du potentiel appliqué. En général nous avons pris $z_1 = 3 \text{ cm}$. Des valeurs typiques du champ électrique dans la zone où il est constant vont de 5 V/cm à 20 V/cm , c'est-à-dire que les électrons gagnent une grande partie de leur énergie dans le premier centimètre de leur parcours ($3 \text{ cm} \leq \hat{z} \leq 4 \text{ cm}$).

Champ magnétique Nous avons pris un champ magnétique variant selon une loi quadratique entre les valeurs 2 mT en $\hat{z} = 0$ et 20 mT en $\hat{z} = L$ (cf figure 1.7), ce qui est une approximation du champ magnétique dans un SPT en fonctionnement.

Densité de neutres La densité de neutres intervient dans le calcul des termes de collision. Les valeurs avec lesquelles nous avons testé le modèle proviennent d'une simulation auto-cohérente de la cavité, car elle dépend du nombre d'atomes ionisés et éjectés de la cavité.

Sections efficaces de collisions Ces données sont propres au Xénon et sont des constantes physiques. Elles proviennent de mesures [33].

Potentiel de gaine, énergie en entrée Nous avons en général pris $\varepsilon_g = 10 \text{ eV}$ pour le potentiel de gaine et $\varepsilon_0 = 15 \text{ eV}$ pour l'énergie des électrons entrant dans la cavité. A la cathode $z = l$, plus précisément, nous avons considéré un faisceau monokinétique d'électrons d'énergie ε_0 , c'est-à-dire que la condition aux limites (1.158) est donnée par

$$F_l(\varepsilon) = k \delta(\varepsilon - \varepsilon_0)$$

où $k \in \mathbb{R}$ est une constante arbitraire et δ est la distribution de Dirac. Par ailleurs, nous considérons qu'aucun électron ne pénètre dans le domaine par l'anode, c'est-à-dire :

$$F_0(\varepsilon) = 0$$

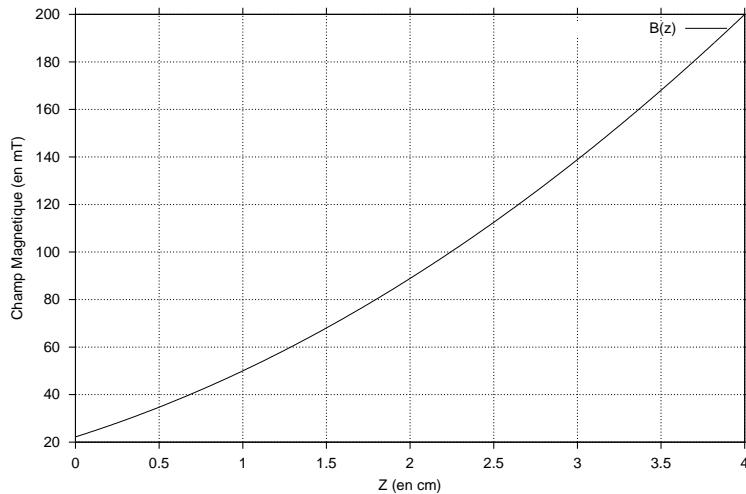


FIG. 1.7 – Représentation du champ magnétique dans un SPT

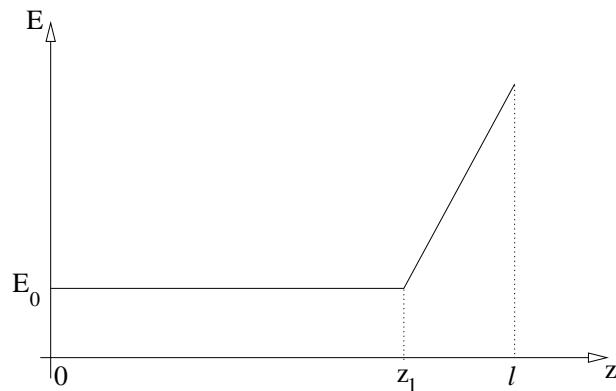


FIG. 1.8 – Représentation du champ électrique dans un SPT

Domaine de calcul

Ayant fixé les données du problème, attachons nous à décrire le domaine où il est nécessaire de calculer $N(z, W)$, i.e. l'ensemble \mathcal{D} des $(z, W) \in [0, l] \times \mathbb{R}$ qu'il est nécessaire de discréteriser. Montrons que W est bornée elle aussi.

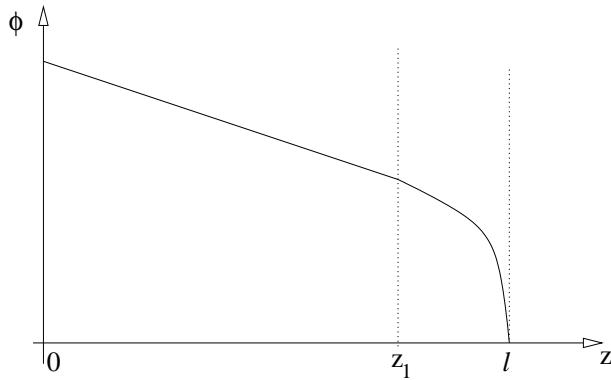


FIG. 1.9 – Représentation du potentiel électrique tel que le champ électrique $E = -\frac{\partial \phi}{\partial z}$ a l'allure donnée par la figure 1.8. Pour $z \in [0, z_1]$, le potentiel électrique est une fonction affine, puis est donné par un arc de parabole pour $z \in [z_1, l]$. Par convention, $\phi(l) = 0$, aussi $\phi(0) = \phi_{max}$ le potentiel total appliqué.

L'énergie des électrons est positive et majorée. En effet, les collisions inélastiques ne peuvent que diminuer l'énergie (cf sections 1.1). D'autre part, les électrons non collisionnels sont soumis au principe de conservation de l'énergie, donc ils ont une énergie totale constante.

Tous les électrons entrant dans la cavité à $z = l$ ont la même énergie ε_0 et nous avons convenu que $\phi(l) = 0$. Alors l'énergie en un point de la cavité z satisfait l'encadrement $0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_0 + \phi(z)$, soit :

$$-\phi(z) \leq W \leq \varepsilon_0.$$

Ces éléments nous permettent de représenter le domaine de calcul \mathcal{D} . En utilisant le potentiel décrit dans le paragraphe précédent, nous obtenons la figure 1.10. Cette figure nous permet d'identifier la frontière de \mathcal{D} et dans le paragraphe suivant nous précisons les conditions aux limites que nous avons imposées.

Remarque 4 *La figure 1.10 nous permet de mettre en relief une hypothèse que nous avons dû faire. Nous avons supposé que le potentiel électrique était monotone, ce qui revient à dire que le champ électrique a toujours la même direction. D'éventuels rebroussements du champ électrique se traduiraient par des minima locaux de l'énergie totale (cf figure 1.11). Ayant négligé les collisions superélastiques (c'est-à-dire susceptibles de fournir de l'énergie aux particules), nous avons supprimé le mécanisme qui pourrait empêcher les électrons de s'accumuler dans ces minima locaux. Ainsi, on ne peut s'attendre à l'existence de solutions stationnaires dans ce cas.*

Résumé des équations

Nous résumons ici le problème aux limites à résoudre. Dans la suite, nous notons indifféremment les fonctions de l'énergie cinétique ε , et les fonctions de $W = \varepsilon - \phi(z)$

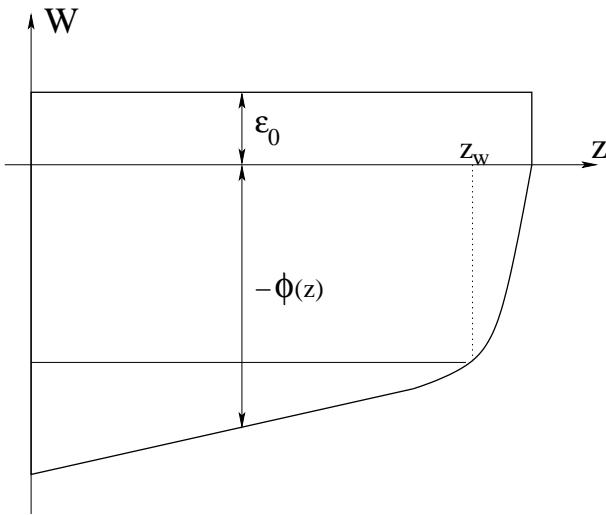


FIG. 1.10 – Domaine de calcul \mathcal{D} dans le plan (z, W) . Les conditions aux limites sont imposées sur $\partial\mathcal{D}_0$, $\partial\mathcal{D}_l$, $\partial\mathcal{D}_\phi$, parties du bord définies par (1.187), (1.188), et (1.189). A W fixé, le point z_W est défini par $z_W = \max \{z / (z, W) \in \mathcal{D}\}$.

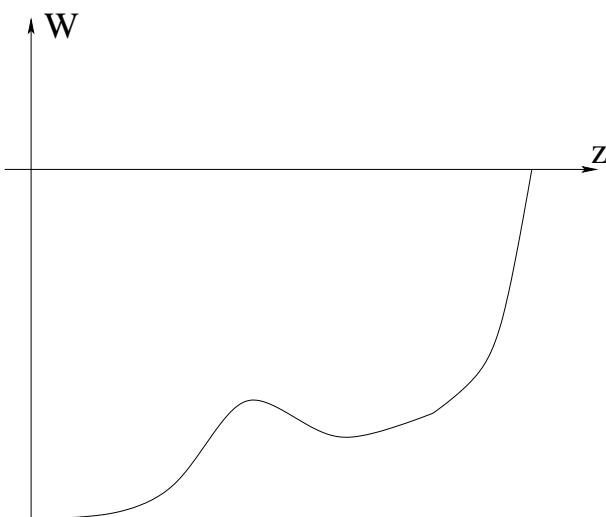


FIG. 1.11 – Minima locaux de l'énergie totale dans le cas où le champ électrique présente des rebroussements.

l'énergie totale. L'équation de diffusion posée sur le domaine \mathcal{D} est l'équation (1.69), que nous rappelons :

$$-\frac{\partial}{\partial z} \mathbb{D}(z, W) \frac{\partial}{\partial z} N = \mathbb{Q}(N) \quad (1.184)$$

où le calcul du coefficient de diffusion \mathbb{D} est décrit dans la section 1.7 et l'opérateur de collision \mathbb{Q} est défini dans les sections 1.3 et 1.4. Dans les variables (z, W) , les conditions aux limites de Robin (1.157) et (1.158) s'écrivent :

$$N(0, W) - \eta \Lambda_0(W) \frac{\partial}{\partial z} N(0, W) = 0 \quad (1.185)$$

$$N(l, W) + \eta \Lambda_l(W) \frac{\partial}{\partial z} N(l, W) = F_l(W) \quad (1.186)$$

Ces conditions s'appliquent sur les parties $\partial\mathcal{D}_0$ et $\partial\mathcal{D}_l$ du domaine \mathcal{D} :

$$\partial\mathcal{D}_0 = \{(z, W) \in \mathcal{D} / z = 0\} \quad (1.187)$$

$$\partial\mathcal{D}_l = \{(z, W) \in \mathcal{D} / z = l\} \quad (1.188)$$

Nous y ajoutons la condition (1.174) sur le bord $(z, \varepsilon) \in [0, l] \times \{0\}$, c'est-à-dire sur :

$$\partial\mathcal{D}_\phi = \{(z, W) \in \mathcal{D} / W = -\phi(z)\} \quad (1.189)$$

ce qui revient à écrire, en notant $z_W = \max\{z / (z, W) \in \mathcal{D}\}$:

$$\mathcal{J}(z_W, W) = 0, \quad \forall W, (-\phi_{max} \leq W \leq \varepsilon_0),$$

où \mathcal{J} est défini par (1.173).

Finalement, le problème à résoudre se résume à :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial z} \mathcal{J}(z, W) = \mathbb{Q}(N) \quad \forall (z, W) \in \mathcal{D} \\ \mathcal{J}(z, W) = -\mathbb{D}(z, W) \frac{\partial N}{\partial z}(z, W) \\ \\ N(0, W) - \eta \Lambda_0(W) \frac{\partial}{\partial z} N(0, W) = 0, \quad \forall W, (0 \leq W \leq \varepsilon_0) \\ N(l, W) + \eta \Lambda_l(W) \frac{\partial}{\partial z} N(l, W) = F_l(W + \phi), \quad \forall W, (-\phi_{max} \leq W \leq \varepsilon_0) \\ \mathcal{J}(z, W) = 0, \quad \forall (z, W) \in \partial\mathcal{D}_\phi \end{array} \right. \quad (1.190)$$

1.8.2 Discrétisation

Décrivons à présent la discrétisation de (1.190). Dans un premier temps nous donnons quelques indications quant au maillage de \mathcal{D} , puis nous présentons les discrétisations des équations à $W = cte$, ainsi que la prise en compte des conditions aux limites. Enfin, compte tenu de l'expression de l'opérateur de collision \mathbb{Q} , nous montrons que l'on peut se ramener à une suite de problèmes posés sur les segments $\{z, (z, W_i) \in \mathcal{D}\}$.

Maillage du domaine

Dans la section précédente, nous avons décrit le domaine de résolution. La nature de (1.190) nous a poussé à choisir une méthode de résolution numérique utilisant un maillage cartésien.

Pour discréteriser l'équation de diffusion de (1.190), il est naturel de placer les mailles aux intersections des droites ($z = Cte$) et ($W = cte$) car cette équation porte sur une fonction de l'énergie totale W . Les mailles situées sur une droite ($W = Cte$) permettent de construire une approximation de l'opérateur de diffusion, tandis que les mailles situées sur une droite ($z = Cte$) permettent de construire une approximation des opérateurs de collision (cf figure 1.12) [26]. Le maillage de \mathcal{D} est donc déterminé par :

- (W_0, \dots, W_{p+1}) un maillage de $[-\phi_{max}, \varepsilon_0]$, avec $W_0 = -\phi_{max}$ et $W_{p+1} = \varepsilon_0$;
- (z_0, \dots, z_{N+1}) un maillage de $[0, l]$, avec $z_0 = 0$ et $z_{N+1} = l$.

Notons $\Delta W = \max_{0 \leq i \leq p} \{W_{i+1} - W_i\}$ et $\Delta z = \max_{0 \leq i \leq n} \{z_{i+1} - z_i\}$. Les calculs ont été réalisés en se donnant le maillage (W_0, \dots, W_{p+1}) et en considérant $z_i = z_{W_i} = \max \{z / (z, W_i) \in \mathcal{D}\}$. La figure 1.13 illustre un maillage de ce type. Notons que le maillage de W est libre, et nous avons utilisé des maillages plus denses là où la pente de $\phi(z_W)$ est faible, en particulier lorsque le champ électrique E_0 (cf paragraphe 1.8.1) est faible.

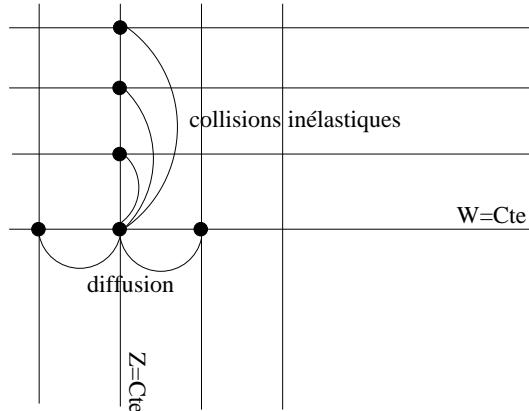


FIG. 1.12 – graphe de dépendance d'une maille pour la résolution de (1.190)

Ce choix étant fait, nous devons simuler correctement la physique du SPT. Une échelle d'énergie importante est donnée par les différents seuils (gaine, ionisation excitation), qui valent approximativement 10 eV. La largeur de maille maximale ΔW doit être plusieurs fois plus petite que ces seuils. Par ailleurs, les simulations numériques montrent que 700 mailles suffisent pour mailler $[-\phi_{max}, \varepsilon_0]$ et atteindre une bonne approximation de la solution de (1.190), ce qui fait qu'en pratique nous utiliserons des intervalles d'environ 0,5 eV.

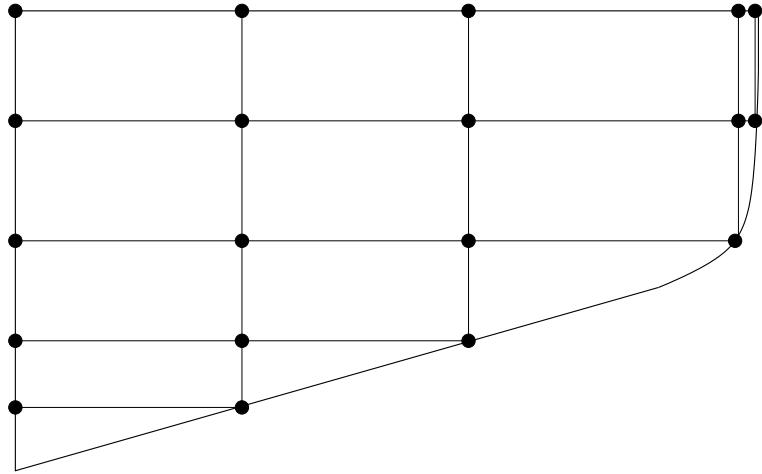


FIG. 1.13 – Maillage défini par les intersections z_{W_i} des droites $W = W_i$ et de la courbe $W = -\phi(z)$.

Discrétisation du problème de diffusion à $W = Cte$

Notons (z_0, \dots, z_{n+1}) un maillage du segment $[0, z_W]$, avec $z_0 = 0$ et $z_{n+1} = z_W$ (cf figure 1.10). Afin de proposer une discrétisation de (1.190), qui est sous forme conservative, nous avons choisi le point de vue des méthodes de volumes finis [32]. Considérons N_j et Q_j , destinés à approcher $N(z_j, W)$ et $Q(N)(z_j, W)$, et $\mathcal{J}_{j+1/2}$ le flux approché au point $z_{j+1/2} = \frac{z_{j+1}+z_j}{2}$. Alors en intégrant $\frac{\partial}{\partial z} \mathcal{J} = Q(N)$ par rapport à z , sur les intervalles $[z_{j-1/2}, z_{j+1/2}]$, on obtient pour $1 \leq j \leq n$:

$$\mathcal{J}_{j+1/2} - \mathcal{J}_{j-1/2} = (z_{j+1/2} - z_{j-1/2}) Q_j \quad (1.191)$$

et nous approchons les flux aux interfaces par :

$$\mathcal{J}_{j+1/2} = -d_{j+1/2} \frac{N_{j+1} - N_j}{z_{j+1} - z_j} \quad (1.192)$$

où $d_{j+1/2} = \langle \mathbb{D}(z_j), \mathbb{D}(z_{j+1}) \rangle$ est une moyenne entre $\mathbb{D}(z_j)$ et $\mathbb{D}(z_{j+1})$ que nous détaillons plus loin. En remplaçant (1.192) dans (1.191), on obtient le schéma linéaire, pour $1 \leq j \leq n$:

$$\begin{aligned} & N_{j-1} \left(\frac{-d_{j-\frac{1}{2}}}{(z_j - z_{j-1})(z_{j+\frac{1}{2}} - z_{j-\frac{1}{2}})} \right) \\ & + N_j \left(\frac{d_{j+\frac{1}{2}}}{(z_{j+1} - z_j)(z_{j+\frac{1}{2}} - z_{j-\frac{1}{2}})} + \frac{d_{j-\frac{1}{2}}}{(z_j - z_{j-1})(z_{j+\frac{1}{2}} - z_{j-\frac{1}{2}})} \right) \\ & + N_{j+1} \left(\frac{-d_{j+\frac{1}{2}}}{(z_{j+1} - z_j)(z_{j+\frac{1}{2}} - z_{j-\frac{1}{2}})} \right) = Q_j \end{aligned}$$

Par construction, ce schéma garantit la conservation du courant au niveau discret. C'est une qualité essentielle, mais le choix de la moyenne $d_{j+1/2} = \langle \mathbb{D}(z_j), \mathbb{D}(z_{j+1}) \rangle$ ne l'est pas moins. Nous avons choisi la moyenne harmonique :

$$d_{j+1/2} = \left(\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mathbb{D}(z_j)} + \frac{1}{\mathbb{D}(z_{j+1})} \right) \right)^{-1} \quad (1.193)$$

ce qui nous conduit en définitive au schéma de Sharfetter Gummel, dont l'utilisation est courante dans le domaine des semi-conducteurs [37]. Il fait partie de la classe des schémas exponentiels et son intérêt tient à sa grande stabilité lorsque le coefficient de diffusion varie fortement [9].

Conditions aux limites

Il reste à intégrer $\frac{\partial}{\partial z} \mathcal{J} = \mathbb{Q}(N)$ sur les intervalles $[z_0, z_{1/2}]$ et $[z_{n+1/2}, z_{n+1}]$. Nous obtenons les relations :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{1/2} - \mathcal{J}_0 &= (z_{1/2} - z_0) \mathbb{Q}_0 \\ &= \frac{z_1 - z_0}{2} \mathbb{Q}_0 \end{aligned} \quad (1.194)$$

et

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{n+1} - \mathcal{J}_{n+1/2} &= (z_{n+1} - z_{n+1/2}) \mathbb{Q}_{n+1} \\ &= \frac{z_{n+1} - z_n}{2} \mathbb{Q}_{n+1}. \end{aligned} \quad (1.195)$$

Selon que l'on impose une condition de Neumann ou de Robin, on est amené à remplacer, d'après (1.185) et (1.186) :

$$\begin{aligned} \text{Neumann :} \quad \mathcal{J}_{n+1} &= 0 \\ \text{Robin en } z = 0 : \quad \mathcal{J}_0 &= -\mathbb{D}(0, W) \left(\frac{N_0}{\eta \Lambda_0(W)} \right) \\ \text{Robin en } z = l : \quad \mathcal{J}_{n+1} &= -\mathbb{D}(l, W) \left(\frac{F_l(W) - N_{n+1}}{\eta \Lambda_l} \right) \end{aligned}$$

En utilisant ces relations dans (1.194), nous obtenons les équations, pour $j = 0$:

$$N_0 \left(\frac{2d_{1/2}}{(z_1 - z_0)^2} + \frac{2\mathbb{D}(0, W)}{\eta(z_1 - z_0)\Lambda_0(W)} \right) - N_1 \left(\frac{2d_{1/2}}{(z_1 - z_0)^2} \right) = \mathbb{Q}_0$$

et pour $j = n + 1$ selon que l'on impose une condition de Neumann ($z_W \neq l$) :

$$N_n \left(\frac{-2d_{n+1/2}}{(z_{n+1} - z_n)^2} \right) + N_{n+1} \left(\frac{2d_{n+1/2}}{(z_{n+1} - z_n)^2} \right) = \mathbb{Q}_{n+1}$$

ou de Robin ($z_W = l$) :

$$\begin{aligned} N_n \left(\frac{-2d_{n+1/2}}{(z_{n+1} - z_n)^2} \right) \\ + N_{n+1} \left(\frac{2d_{n+1/2}}{(z_{n+1} - z_n)^2} + \frac{2\mathbb{D}(l, W)}{\eta(z_{n+1} - z_n)\Lambda_l} \right) = \mathbb{Q}_{n+1} \\ + \frac{2\mathbb{D}(l, W) F_l(W)}{\eta(z_{n+1} - z_n)\Lambda_l(W)} \end{aligned}$$

Découplage des seconds membres

Dans cette section, nous parlerons de “niveaux d’énergie” pour désigner les segments $[0, z_W] = \{z, (z, W) \in \mathcal{D}\}$, et nous montrons que la résolution du problème (1.190) se ramène à une suite de problèmes sur ces niveaux.

En toute généralité, les inconnues aux mailles sont liées

- sur un même niveau par l’équation de diffusion,
- entre les niveaux par l’opérateur de collision.

Ceci nous contraindrait à construire un système linéaire impliquant tous les points du maillage. Ceci n’est pas souhaitable du point de vue numérique car le système obtenu serait de grande taille, et la matrice ne serait pas creuse à cause des termes de collision.

En fait, notre problème peut être réduit à la résolution d’une suite de systèmes linéaires correspondant à chaque niveau d’énergie. En effet, en examinant les différentes contributions à l’opérateur de collisions (données par les propositions 1, 3, 4 et 5), nous constatons que $\mathbb{Q}(N)(z, \varepsilon)$ ne dépend que des valeurs de $N(z, \varepsilon')$ dont l’énergie est supérieure ou égale à l’énergie considérée ε . Cette constatation est également valable pour l’énergie totale puisque $\varepsilon = W + \phi(z)$ et z est fixé.

Ceci autorise à découpler les niveaux d’énergie totale pourvu que l’on procède des énergies les plus hautes vers les plus basses : on se limite à la construction de systèmes linéaires pour chacun des niveaux, et le second membre (qui contient le couplage avec les autres niveaux d’énergie) peut être calculé puisque les valeurs de $N(z, \varepsilon')$ dont il dépend sont connues (cf figure 1.14).

Ceci termine la description de la discréétisation du modèle SHE. Nous sommes ainsi conduits à résoudre $p + 1$ systèmes linéaires, p étant le nombre de mailles W_i entre $-\phi_{max}$ et ε_0 . Le schéma numérique défini dans les paragraphes 1.8.2 et 1.8.2 conduit à des matrices tridiagonales. Par ailleurs, l’opérateur de collision ne modifie que la diagonale de cette matrice par le biais des termes de pertes $-\gamma_i(W) N(z, W)$, où γ_i décrit les pertes par attachement, excitation et ionisation. Finalement, nous pouvons donc utiliser une factorisation LU adaptée aux matrices tridiagonales, ce qui rend la résolution rapide et robuste. La section suivante donne quelques exemples de résultats numériques.

1.9 Résultats numériques

Nous présentons dans cette section quelques exemples de résultats numériques. En particulier, nous comparons nos résultats avec ceux obtenus à l’aide d’une méthode de Monte Carlo. Après avoir rappelé l’intérêt du calcul de la fonction de distribution en énergie des électrons (FDEE) et des grandeurs moyennes qui s’en déduisent, nous présentons quelques résultats numériques. Nous renvoyons le lecteur au chapitre 3 pour une exploitation approfondie des codes SHE et Monte Carlo.

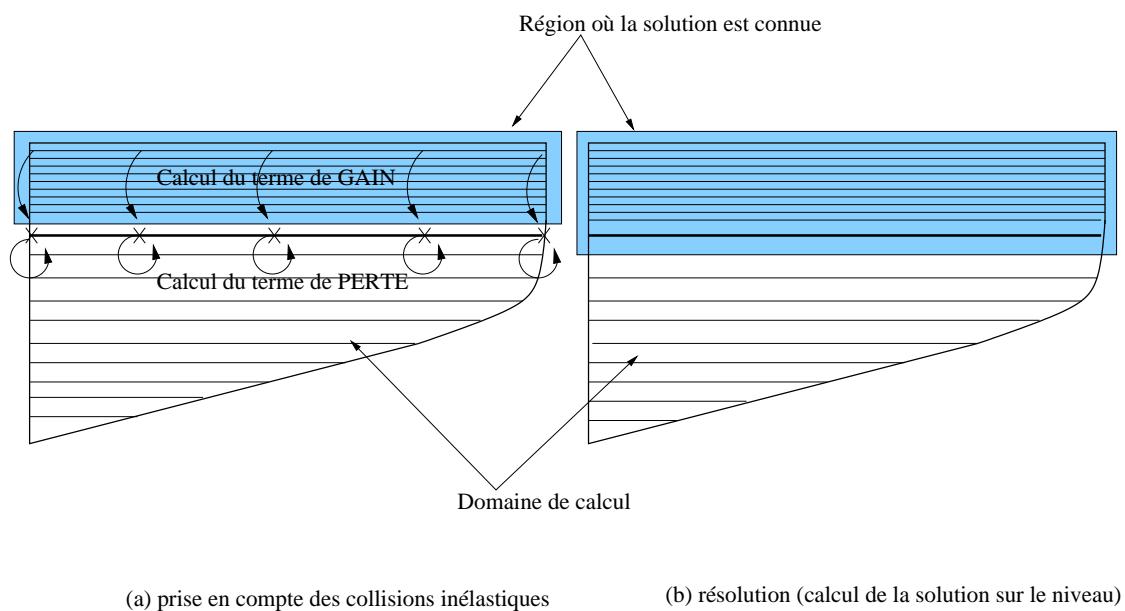


FIG. 1.14 – démarche pour la résolution : les croix symbolisent les points du maillage, où la fonction inconnue sera calculée. Les flèches illustrent les dépendances d'une inconnue pour le calcul du second membre. Les termes de gain ne dépendent que des valeurs correspondant à des énergies plus élevées, donc la résolution niveau par niveau est possible en commençant par l'énergie la plus élevée.

1.9.1 Intérêt en physique

Dans ce paragraphe, nous mettons en relief l'intérêt de connaître la FDEE pour la simulation du SPT. D'une façon générale, la FDEE $N(z, \varepsilon)$ permet de connaître la répartition des électrons en espace et en énergie. A l'équilibre thermodynamique, la FDEE est Maxwellienne, et elle est une fonction de la température de la population [21] (que nous définissons dans le paragraphe 1.9.1). Toutefois, la FDEE est loin d'être Maxwellienne dans le SPT, ce qui a motivé notre étude [7].

Calcul de grandeurs moyennes

La FDEE permet de calculer des quantités macroscopiques moyennes. Rappelons qu'une approximation du nombre de particules situées dans $[z, z + dz]$ et ayant une énergie dans $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$ est :

$$d\mathcal{N} = N(z, \varepsilon, t) 4\pi \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon dz.$$

Définissons alors la densité de probabilité :

$$f(z, \varepsilon) d\varepsilon = \frac{N(z, \varepsilon) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon}{\int_{\varepsilon \in \mathbb{R}^+} N(z, \varepsilon) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon}$$

qui donne la probabilité de trouver un électron dans $[z, z + dz]$ et ayant une énergie dans $[\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon]$. Nous appellerons $f(z, \varepsilon)$ *fonction de distribution normalisée*. Alors nous considérons la moyenne d'une fonction $h(z, \varepsilon)$:

$$\langle h \rangle(z) = \int_{\varepsilon \in \mathbb{R}} h(z, \varepsilon) f(z, \varepsilon) d\varepsilon,$$

Energie et fréquences de collisions moyennes

Dans la pratique, les moyennes le plus couramment utilisées sont :

- L'énergie moyenne :

$$\langle \varepsilon \rangle(z) = \int_{\varepsilon \in \mathbb{R}} \varepsilon f(z, \varepsilon) d\varepsilon,$$

- les fréquences moyennes des collisions, calculées à partir de la fréquence d'un type de collision $\nu_i(z, \varepsilon)$ (cf section 1.4) :

$$\langle \nu_i \rangle(z) = \int_{\varepsilon \in \mathbb{R}} \nu_i(z, \varepsilon) f(z, \varepsilon) d\varepsilon.$$

En particulier, la moyenne la plus importante pour la simulation de la cavité d'un SPT est la fréquence moyenne d'ionisation, puisque c'est cette grandeur qui détermine le nombre d'ionisations, et donc la production des ions qui servent à la propulsion.

1.9.2 Résultats typiques

Nous donnons dans ce paragraphe quelques exemples de comparaisons entre les résultats du code Monte Carlo (MC) et ceux du code SHE. Une analyse approfondie des concordances et des divergences des résultats numériques sera faite dans le chapitre 3.

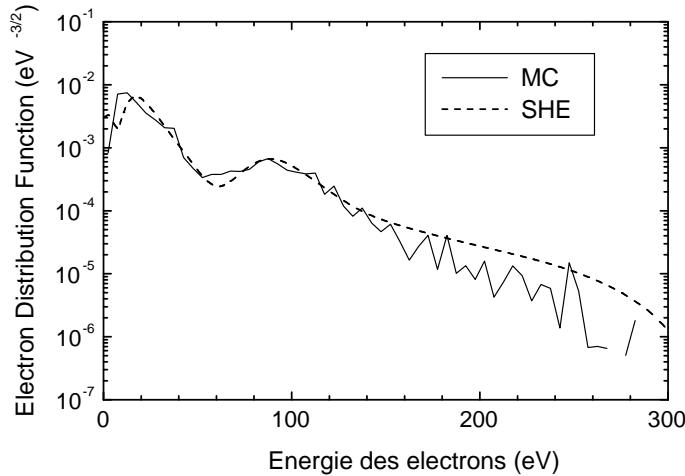


FIG. 1.15 – Fonction de distribution normalisée, près de l'anode. L'ordonnée est tracée en échelle logarithmique.

La figure 1.15 montre un exemple de fonction de distribution normalisée calculée en un point très proche de l'anode ($z = 0.1 \text{ cm}$), dans un cas où toutes les collisions répertoriées dans la section 1.1 sont prises en compte. Sur cette figure, la concordance est bonne, sauf éventuellement pour les énergies les plus faibles. Nous avons examiné de nombreux cas différents, et pour chacun d'eux, nous avons constaté une bonne concordance quantitative, et une concordance qualitative remarquable comme l'attestent les résultats des chapitres 2 et 3.

En ce qui concerne les quantités moyennes, l'accord entre les modèles est très dépendant de la fonction à moyenner. En effet, si celle-ci atteint un maximum là où les prédictions des modèles sont en désaccord, alors on obtiendra des moyennes différentes. Dans le cas contraire, on peut être conduit à des prédictions très proches tout en ayant des fonctions de distribution différentes. Les figures 1.16 et 1.17 en sont deux exemples.

Dans le chapitre 3, nous donnons d'autres exemples de comparaisons entre les fonctions de distribution normalisées, et entre des grandeurs moyennes. De plus, nous proposons une analyse des éléments favorisant une bonne concordance et des éléments à améliorer dans le cas où une bonne précision (quantitative) est attendue. Enfin, nous utilisons le code SHE pour discuter de la validité de l'hypothèse selon laquelle la population des électrons est Maxwellienne. Cette hypothèse est d'une grande importance pour la mise au point de simulations instationnaires du SPT et nous apportons une ré-

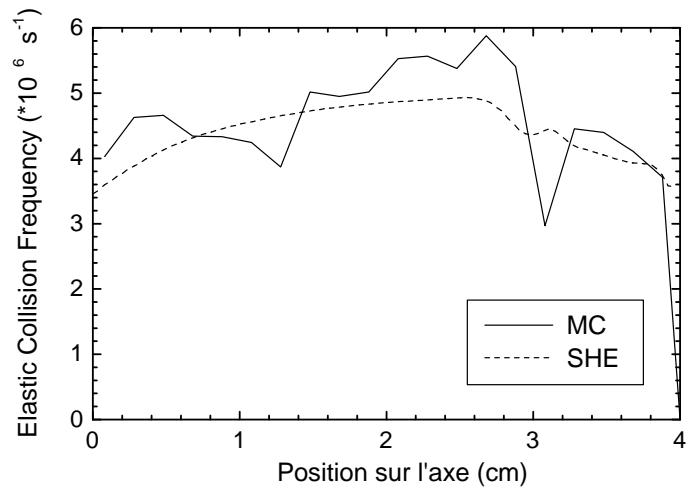


FIG. 1.16 – Toutes collisions, fréquence moyenne de collisions élastiques entre les électrons et les neutres.

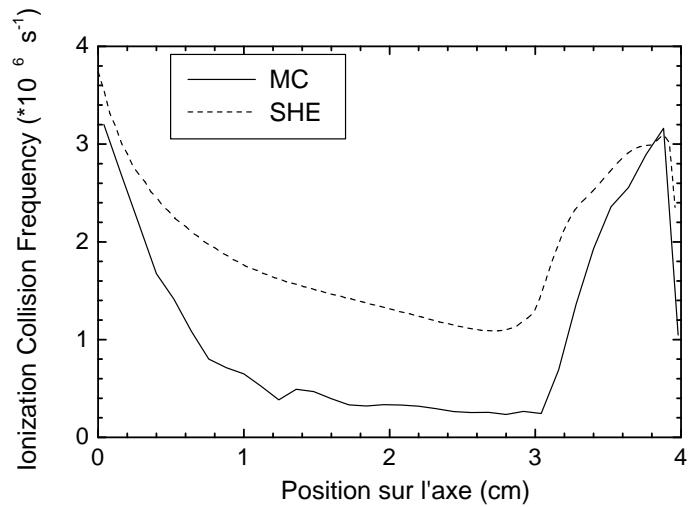


FIG. 1.17 – Toutes collisions, fréquence moyenne d'ionisation

ponse inattendue à cette question.

Chapitre 2

Electron Transport in Stationary Plasma Thrusters

Electron Transport in Stationary Plasma Thrusters

Pierre Degond*, Vladimir Latocha^{†,*}
Laurent Garrigues[†], Jean Pierre Boeuf[†]

† Centre de Physique des Plasmas et Applications de Toulouse
(ESA 5002) 118, route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex, France

* Mathématiques pour l'Industrie et la Physique (UMR CNRS 9974)
UFR MIG 118, route de Narbonne, 31062 Toulouse Cedex, France

Abstract

We present a diffusion model describing electron transport in plasma thrusters. The model is obtained by a diffusion approximation technique from a kinetic transport model including scattering at the walls. Realistic attachment and secondary emission processes are taken into account. Numerical solutions of the model are compared with Monte Carlo simulations and a fairly good agreement is observed at a much lower CPU-cost.

1 Introduction

Most satellites achieve their altitude and attitude control motions by means of ergol engines. In order to reduce the embarked mass, many teams have been designing systems that use the electrical energy produced by solar panels (for instance). The Russian Stationary Plasma Thruster (SPT) has been one of the most successful attempts [4].

Though SPT's have been successfully used for more than two decades, the understanding of the underlying physics yet requires a lot of efforts. In [8][9], a macroscopic transport diffusion model for the energy distribution function of the electrons is derived under the assumption that the dynamics is driven by collisions against the wall. This is the so-called near wall conductivity regime [12]. In the present paper we provide numerical comparisons between the model and Monte Carlo simulation in a physically more realistic setting than in [9] (in particular including secondary emission).

We refer to [9] for a general review about electron transport in the SPT. We also refer to [1] for a general review about the diffusion approximation technique in the case of collisions with the boundary, which the present approach [8], [9] is derived from. Finally we refer to [13] for a discussion of complete models for the SPT (including ions and neutrals). The present work provides an efficient way of computing the energy distribution function of the electrons in a section of the SPT. It opens the way to self-consistent calculation (in which the distribution function is updated with the evolution of the electric and magnetic fields), which could be coupled with fluid-like or particle simulations of the ion and neutral motions.

2 The Model

In a Stationary Plasma Thruster (SPT) a neutral gas (Xe) is ionized by a current of electrons and the resulting ions are accelerated by the electric field and provide the thrust. The device consists of two coaxial cylinders limiting a cavity where an electric field is set longitudinally. An external cathode emits electrons which are electrically accelerated towards the anode, where the 5 mg/s fbw of Xenon is injected. To improve the ionization efficiency a radial magnetic field is used to confine the electrons.

In this paper we study the transport properties of the electrons in the thruster. For simplicity the cavity is modelled by two coaxial dielectric cylinders of radii $R_0 < R_1$, and of length L . The position vector in cylindrical coordinates is denoted by $\hat{x} = (\hat{r}, \hat{z})$, \hat{r} being the distance to the axis, \hat{z} the distance along the axis and (e_r, e_θ, e_z) is the local basis associated with cylindrical coordinates (see figure 1). Inside the cavity the electrons are subject to a longitudinal electric field $\vec{E} = E(\hat{z})\vec{e}_z$, and a given magnetic field $\vec{B} = \hat{B}(\hat{r}, \hat{z})\vec{e}_r$ (produced by an electro magnet).

In the present paper, we consider that electron collisions with neutral atoms or ions are negligible. This assumption will be waived in a future work. So the electrons are assumed to move in between the two cylinders according to a collisionless transport equation. Let $\hat{f}(\hat{x}, \hat{v}, \hat{t})$ be the electron distribution function, depending on the position vector $\hat{x} = (\hat{r}, \hat{z}) \in [R_0, R_1] \times [0, L]$, the velocity vector $\hat{v} = (\hat{v}_r, \hat{v}_\theta, \hat{v}_z) \in \mathbb{R}^3$ and the time \hat{t} . In this paper we discard the dependence of the distribution function on the azimuthal angle θ on the basis of physical arguments (see [9] for a full treatment of the θ dependence).

The evolution of the distribution function is ruled by:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{t}} + \hat{v}_r \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{r}} + \hat{v}_z \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{z}} + \frac{\hat{v}_\theta^2}{\hat{r}} \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{v}_r} \\ - \left(\frac{\hat{v}_r \hat{v}_\theta}{\hat{r}} + \frac{q}{m} \hat{v}_z \hat{B}(\hat{r}, \theta, \hat{z}) \right) \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{v}_\theta} \end{aligned}$$

$$+ \frac{q}{m} (-\hat{E}(\theta, \hat{z}) + \hat{v}_\theta \hat{B}(\hat{r}, \theta, \hat{z})) \frac{\partial \hat{f}}{\partial \hat{v}_z} = 0, \quad (2.1)$$

where $q > 0$ and m are the electron charge and mass.

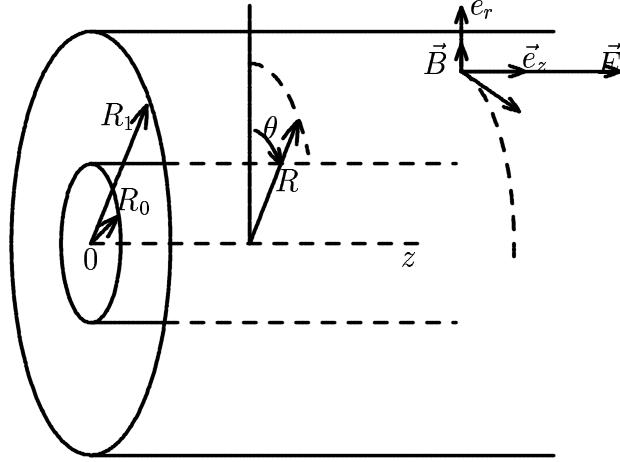


Figure 1: geometry and notations

The collisions of the electrons against the dielectric wall are the major source of *thermalization* of the electrons [12]. Following [12], these collisions are modelled by a combination of specular and diffuse reflexion. The diffuse reflexion term is itself split into elastic collisions (the electrons are re-emitted with the same energy and a random direction), and inelastic ones, whose time scale are slower and which result from two physical processes: attachment to the wall and secondary emission. Then the boundary condition on the internal cylinder reads:

$$\hat{f}_-^0(\hat{v}) = [\gamma_0^a \hat{f}_+^0(\hat{v}_*) + \gamma_0^e \mathcal{E}_0 \hat{f}_+^0] + \mathcal{S}_0 \hat{f}_+^0 \quad \forall \hat{v} \in \mathbb{R}^3, \hat{v}_r > 0, \quad (2.2)$$

where \hat{f}_-^0 (*resp* \hat{f}_+^0) is the incoming (*resp* outgoing) part of the distribution function at the boundary $\hat{r} = R_0$:

$$\hat{f}_-^0 = \hat{f}|_{\{\hat{r}=R_0, \hat{v}_r>0\}}, \quad \hat{f}_+^0 = \hat{f}|_{\{\hat{r}=R_0, \hat{v}_r<0\}}, \quad (2.3)$$

and $\hat{v}_* = (-\hat{v}_r, \hat{v}_\theta, \hat{v}_z)$ is the specularly reflected velocity. We denote by \mathcal{E}_0 the elastic diffuse reflexion operator, defined by :

$$\mathcal{E}_0 \hat{f}_+^0(\hat{v}) = \int_{\{\omega' \in S^2, \omega'_r < 0\}} K_0(\hat{z}, |\hat{v}|, \omega, \omega') \hat{f}_+^0(|\hat{v}| \omega') d\omega', \quad \forall \hat{v} \in \mathbb{R}^3, \hat{v}_r > 0, \quad (2.4)$$

where the velocity direction $\omega = \hat{v}/|\hat{v}|$ belongs to the unit sphere S^2 and $K_0(\hat{z}, |\hat{v}|, \omega, \omega')$ is defined for $\omega, \omega' \in S^2$, $\omega_r > 0$, $\omega'_r < 0$, is nonnegative and satisfies

$$\int_{\{\omega \in S^2, \omega_r > 0\}} K_0(\hat{z}, |\hat{v}|, \omega, \omega') |\omega_r| d\omega = |\omega'_r|, \quad \forall \omega' \in S^2, \omega'_r < 0. \quad (2.5)$$

\mathcal{S}_0 is the secondary emission operator, written according to:

$$\mathcal{S}_0 \hat{f}_+^0(\hat{v}) = \int_{\substack{|v'| > |\hat{v}| \\ v'_r < 0}} S_0(v' \rightarrow \hat{v}) \hat{f}_+^0(v') dv'. \quad (2.6)$$

The integration is performed on $|v'| > |\hat{v}|$ because we assume that an electron undergoing a secondary emission collision can only lose energy. $\gamma_0^e = \gamma_0^e(|v|)$ is the mean number of particles reemitted by an elastic diffuse reflection (of the type (2.4)) for one incident particle. $\gamma_0^a = \gamma_0^a(|v|)$ is the mean number of particles reemitted specularly for one incident particle. We have $0 \leq \gamma_0^e + \gamma_0^a \leq 1$ and attachment happens if $\gamma_0^e < 1$. Similar boundary conditions are imposed on the external cylinder just by reversing the signs of the radial velocities (or their direction $\omega_r = \frac{v_r}{|v|}$), and allowing the parameters $\gamma_1^a, \gamma_1^e, K_1(\hat{z}, |\hat{v}|, \omega, \omega')$ to have different values.

We set boundary conditions at $z = 0$ and $z = L$:

$$f|_{z=0, v_z > 0} = 0, \quad f|_{z=L, v_z < 0} = F(\varepsilon) \text{ given.} \quad (2.7)$$

2.1 Scaling

Our model is based on the assumption that the distance between the cylinders $R_1 - R_0$ is small compared with the radius R_0 of the internal cylinder. The hypothesis is discussed in [9]. We introduce a small parameter η defined by

$$\eta = \frac{R_1 - R_0}{R_0} \ll 1 \quad (2.8)$$

The typical scale of variations of the radial coordinate \hat{r} is thus ηR_0 . At variance, we assume $L \approx R_0$ and set $l = L/R_0$. Therefore, dimensionless radial and longitudinal coordinates $r \in [0, 1]$ and $z \in \mathbb{R}$ are defined by :

$$\hat{r} = R_0 (1 + \eta r), \quad \hat{z} = R_0 z. \quad (2.9)$$

Let E_0 be the typical scale for the electric field and V_0 given by $V_0 = \sqrt{q E_0 R_0 / m}$. Dimensionless electric field $E(z)$ and velocity $v = (v_r, v_\theta, v_z)$ are defined by

$$\hat{E}(\hat{z}) = E_0 E(z) \vec{e}_z, \quad \hat{v} = V_0 v. \quad (2.10)$$

Let B_0 be the typical magnetic field scale, assumed large, i.e. (see [9]) $B_0 = m V_0 / q R_0 \eta = E_0 / \eta V_0$ and t_0 the (diffusion) time scale equal to $t_0 = R_0 / \eta V_0$. The dimensionless magnetic field $B(r, z)$ and time t are then defined by:

$$\hat{t} = t_0 t, \quad \hat{B}(\hat{r}, \hat{z}) = B_0 B(r, z) \quad (2.11)$$

We refer to [9] for a detailed discussion of the scaling.

With the change of coordinates (2.9)–(2.11), equation (2.1) is written in dimensionless form according to

$$\begin{aligned} \eta^2 \frac{\partial f^\eta}{\partial t} + \eta \left(v_z \frac{\partial f^\eta}{\partial z} - E_z(z) \frac{\partial f^\eta}{\partial v_z} + \frac{v_\theta^2}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial f^\eta}{\partial v_r} - \frac{v_r v_\theta}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial f^\eta}{\partial v_\theta} \right) \\ + v_r \frac{\partial f^\eta}{\partial r} + B^\eta(r, z) \left(v_\theta \frac{\partial f^\eta}{\partial v_z} - v_z \frac{\partial f^\eta}{\partial v_\theta} \right) = 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

where $f^\eta = f^\eta(x, v, t)$ is the distribution function depending on the scaled position vector $x = (r, z) \in \Omega = [0, 1] \times [0, l]$, the scaled velocity vector $v = (v_r, v_\theta, v_z) \in \mathbb{R}^3$, and the time t , and

$$\rho^\eta(r) = 1 + \eta r .$$

We scale the boundary condition (2.2) with the hypothesis that energy transfers between the electrons and the walls are much smaller (of order η^2) than the elastic reflection. This assumes

$$\gamma_i^a = 1 - \bar{\gamma}_i^e - \eta^2 \bar{\gamma}_i^a, \quad \bar{\gamma}_i^e = \gamma_i^e = \mathcal{O}(1), \quad \bar{\gamma}_i^a = \mathcal{O}(1), \quad \mathcal{S}_i = \eta^2 \bar{\mathcal{S}}_i \quad (2.13)$$

with $\bar{\mathcal{S}}_i = \mathcal{O}(1)$. Thus (2.2) is rewritten

$$\begin{aligned} f_-^i(v) = (1 - \bar{\gamma}_i^e) f_+^i(v_*) + \bar{\gamma}_i^e \mathcal{E}_i f_+^i(v) \\ + \eta^2 [\bar{\mathcal{S}}_i f_+^i - \bar{\gamma}_i^a f_+^i(v_*)], \quad \forall v \in \mathbb{R}^3, \quad \sigma_i v_r < 0, \end{aligned} \quad (2.14)$$

with $\sigma_0 = -1$, $\sigma_1 = +1$. We note $\mathcal{F}_i f_+^i(v) = (1 - \bar{\gamma}_i^e) f_+^i(v_*) + \bar{\gamma}_i^e \mathcal{E}_i f_+^i$.

3 Derivation of the macroscopic model

3.1 Hilbert expansion

The derivation of the macroscopic model relies on an asymptotic analysis of problem (2.12), (2.14) ($i = 0, 1$) based on the Hilbert Ansatz for f^η :

$$f^\eta = f_0 + \eta f_1 + \eta^2 f_2 + \dots ,$$

and the identification of the terms of equal powers of η in equations (2.12), (2.14) ($i = 0, 1$). The Hilbert expansion is a classical method which links kinetic to fluid theories (see e.g. [5]). Its use in connection with boundary collision operators was first considered in [1]. Here we summarize the method developed in [8], [9].

For brevity, we denote by $\mathcal{A}f$ the differential operator:

$$\mathcal{A}f = v_r \frac{\partial f}{\partial r} + B^\eta(r, z) \left(-v_z \frac{\partial f}{\partial v_\theta} + v_\theta \frac{\partial f}{\partial v_z} \right), \quad r \in (0, 1), \quad v \in \mathbb{R}^3, \quad (3.1)$$

so that the equation (2.12) reads:

$$\begin{aligned} \eta^2 \frac{\partial f^\eta}{\partial t} + \eta \left(v_z \frac{\partial f^\eta}{\partial z} - E_z(z) \frac{\partial f^\eta}{\partial v_z} + \frac{v_\theta^2}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial f^\eta}{\partial v_r} - \frac{v_r v_\theta}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial f^\eta}{\partial v_\theta} \right) \\ + \mathcal{A} f = 0 \end{aligned} \quad (3.2)$$

and by $\mathcal{B}_0 f$, $\mathcal{B}_1 f$ the boundary operators:

$$\mathcal{B}_i f = f_-^i(v) - \mathcal{F}_i f_+^i(v), \sigma_i v_r < 0. \quad (3.3)$$

With these notations, the identification of the terms of equal powers of η in equations (2.12), (2.14) ($i = 0, 1$) leads to the following sequence of problems :

(i) order η^0 :

$$\mathcal{A} f_0(x, v) = 0, (x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3, \quad (3.4)$$

$$\mathcal{B}_i f_0(z, v) = 0, z \in \mathbb{R}, v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0, \quad (3.5)$$

(ii) order η^1 :

$$\mathcal{A} f_1(x, v) = g_1, (x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3, \quad (3.6)$$

$$\mathcal{B}_i f_1(z, v) = 0, z \in \mathbb{R}, v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0, \quad (3.7)$$

with

$$g_1(x, v) = -v_z \frac{\partial f_0}{\partial z} + E_z(z) \frac{\partial f_0}{\partial v_z} - \frac{v_\theta^2}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial f_0}{\partial v_r} + \frac{v_r v_\theta}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial f_0}{\partial v_\theta},$$

(iii) order η^2 :

$$\mathcal{A} f_2(x, v) = g_2, (x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3, \quad (3.8)$$

$$\mathcal{B}_i f_2(z, v) = h_i, z \in \mathbb{R}, v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0, \quad (3.9)$$

with

$$g_2(x, v) = -\frac{\partial f_0}{\partial t} - v_z \frac{\partial f_1}{\partial z} + E_z(z) \frac{\partial f_1}{\partial v_z} - \frac{v_\theta^2}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial f_1}{\partial v_r} + \frac{v_r v_\theta}{\rho^\eta(r)} \frac{\partial f_1}{\partial v_\theta},$$

$$h_i(z, v) = \mathcal{S}_i f_+^i - \bar{\gamma}_i^a f_+^i(v_*) , i = 0, 1, z \in \mathbb{R}, v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0.$$

3.2 Solution of the Hilbert expansion, derivation of the model

The three systems share the same structure. They are of the form

$$\mathcal{A} f(x, v) = g, (x, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3, \quad (3.10)$$

$$\mathcal{B}_i f(z, v) = h_i, z \in \mathbb{R}, v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0, \quad (3.11)$$

We introduce the following additional hypothesis, which is discussed (in a slightly different framework) in [5].

Hypothesis 1 *Reciprocity relation :*

$$|\omega_r| K_i(\omega, \omega') = |\omega'_r| K_i(-\omega', -\omega), \forall \omega, \omega' \in S^2, \sigma_i \omega_r < 0, \sigma_i \omega'_r < 0. \quad (3.12)$$

Then the following theorem is a simplified version of theorem (A1) of [9], whose proof is omitted. We note $v = u\omega$, $u > 0$, $\omega \in S^2$ the spherical coordinates of v .

Theorem 1 (i) *Let $g = 0$, $h_i = 0$, $i = 0, 1$. The set of solutions of (3.10), (3.11) (say in $L^\infty([0, 1]_u, L^1[0, 1]_r \times S_\omega^2)$) consists of functions of u only (i.e. independent of r and ω).*

(ii) *Let $g \neq 0$, $h_i \neq 0$, $i = 0, 1$. The necessary and sufficient condition for problem (3.10), (3.11) to be solvable (say in $L^\infty([0, 1]_u, L^1[0, 1]_r \times S_\omega^2)$) is:*

$$\int_0^1 \int_{S^2} g(r, u\omega) dr d\omega + u \sum_{i=0,1} \int_{\omega \in S^2, \sigma_i \omega_r < 0} h_i(u\omega) |\omega_r| d\omega = 0, \forall u > 0 \quad (3.13)$$

Furthermore, f is unique under the additional condition:

$$\int_0^1 \int_{S^2} f(r, u\omega) dr d\omega = 0, \forall u > 0 \quad (3.14)$$

In [9], additional evenness and oddness properties of f are quoted under some assumptions on the scattering kernel. They will not be recalled here.

Then the general solution of the system (3.4), (3.5) has the form:

$$f_0(x, v) = L(z, u, t),$$

where the function $L(z, u, t)$ is arbitrary at this stage.

The solvability condition for system (3.6), (3.7) is satisfied without additional requirement, by evenness considerations, and $f_1(x, v)$ can be expressed in terms $D(x, v)$, the solution of:

$$\begin{cases} \mathcal{A} D(z, v) &= \omega_z / 4\pi, & (z, v) \in \Omega \times \mathbb{R}^3, \\ \mathcal{B}_i f(z, v) &= 0, & z \in \mathbb{R}, v \in \mathbb{R}^3, \sigma_i v_r < 0, \\ \int_0^1 \int_{S^2} D(r, u, \omega) dr d\omega &= 0 \end{cases} \quad (3.15)$$

by

$$f_1(x, v) = -D \cdot \left(u \frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial u} \right) L(z, u, t) \quad (3.16)$$

The evolution equation for L is obtained by expressing the necessary condition for the existence of a solution of the third system (3.8), (3.9). Introducing $N(z, \varepsilon = \frac{u^2}{2}, t) = L(z, u, t)$, we get [9]:

$$\sqrt{2\varepsilon} \frac{\partial N}{\partial t} - \left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) \cdot \left[\mathbb{D} \left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N \right] = Q(N). \quad (3.17)$$

with

$$\mathbb{D} = (2\varepsilon)^{3/2} \int_0^1 \int_{S^2} D \omega_z dr d\omega \quad (3.18)$$

and

$$Q(N)(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{2\pi} \sum_{i=0,1} \left[\int_{(\omega \in S^2, \sigma_i \omega_r < 0)} \bar{\mathcal{S}}_i(N)(\sqrt{2\varepsilon}\omega) |\omega_r| d\omega - N(\varepsilon) \int_{(\omega \in S^2, \sigma_i \omega_r < 0)} \bar{\gamma}_i^a(\sqrt{2\varepsilon}) |\omega_r| d\omega \right] \quad (3.19)$$

with \mathcal{S}_i and $\bar{\gamma}_i^a$ defined in (2.6) and (2.14).

The quantity $d\mathcal{N} = N(z, \varepsilon, t) 4\pi \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon dz$ is the number of particles located at time t in a section $(z, z+dz)$ with a kinetic energy $\varepsilon = u^2/2$ comprised between ε and $\varepsilon + d\varepsilon$. Therefore, $N(z, \varepsilon, t)$ has indeed the meaning of a distribution function in energy space in a transverse section of the thruster.

3.3 Diffusion coefficient in the isotropic case

The elastic diffusion operator is said to be isotropic, when the collision kernels K_i , $i = 0, 1$ are independent of ω . By the reciprocity relation (3.12), they are then given by :

$$K_i(z, u, \omega, \omega') = \frac{|\omega'|}{\pi}, \quad i = 0, 1, \quad \sigma_i \omega_r < 0 \quad \sigma_i \omega'_r > 0, \quad (3.20)$$

In this case the solution $D(z, \varepsilon)$ of (3.15) can be computed analytically and leads to [8] [9] :

$$\mathbb{D}(z, \varepsilon) = \frac{\varepsilon^2 \beta}{B^2} \int_0^1 \left(\left(1 - \cos \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon} w} \right)^2 + \frac{\gamma}{\beta} \sin^2 \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon} w} \right) w (1 - w^2) dw, \quad (3.21)$$

with

$$\gamma(z, \varepsilon) = \frac{4 - 2(\bar{\gamma}_0^e + \bar{\gamma}_1^e) + \bar{\gamma}_0^e \bar{\gamma}_1^e}{\bar{\gamma}_0^e \bar{\gamma}_1^e - \bar{\gamma}_0^e - \bar{\gamma}_1^e}, \quad \beta(z, \varepsilon) = \frac{\bar{\gamma}_0^e \bar{\gamma}_1^e}{\bar{\gamma}_0^e \bar{\gamma}_1^e - \bar{\gamma}_0^e - \bar{\gamma}_1^e} \quad (3.22)$$

The expression (3.21) can be efficiently computed by means of a reduction to trigonometric polynomials and the integral cosine function.

3.4 Attachment and secondary emission

We first write the scattering operator in a more convenient form. According to (3.19), substituting $\mathcal{S}_i(N)$ with its expression involving the kernel S_i , and exchanging the order of the integrations, we have:

$$Q(N)(\varepsilon) = \int_{\varepsilon' > \varepsilon} \sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) N(\varepsilon', z, t) d\varepsilon' - \overline{\gamma^{inel}}(\varepsilon) \cdot N(\varepsilon, z, t) \quad (3.23)$$

with :

$$\overline{\gamma^{inel}}(\varepsilon) = \frac{\varepsilon}{2} \sum_{i=0,1} \bar{\gamma}_i^a(\sqrt{2\varepsilon}\omega) \quad (3.24)$$

$$\sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) = \frac{\varepsilon\sqrt{2\varepsilon'}}{2\pi} \sum_{i=0,1} \int_{\omega \in S^2} \int_{\omega' \in S^2} \int_{\sigma_i \omega_r < 0} \int_{\sigma_i \omega'_r > 0} \bar{S}_i(\sqrt{2\varepsilon'}\omega' \mapsto \sqrt{2\varepsilon}\omega) |\omega_r| d\omega d\omega'. \quad (3.25)$$

So far, the operator \mathcal{S}_i as given by (2.6) can describe a wide class of inelastic scattering phenomena at the boundary. We now assume that a given outgoing electron with velocity v' gives rise to two incoming electrons with velocity v and v'' respectively, satisfying the energy conservation relation

$$|v'|^2 = |v|^2 + |v''|^2. \quad (3.26)$$

By the indiscernability of these two electrons, this gives rise to the following reciprocity relation :

$$\sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) = \sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon' - \varepsilon) \quad (3.27)$$

To proceed, we must now look more carefully at the physical processes which give rise to the secondary emission and attachment processes. Let $\gamma^\dagger(\varepsilon)$ be the mean number of electrons re-emitted for one electron hitting the wall with an energy ε . We suppose, following the measured data [6], that γ^\dagger is an increasing function of ε . We also assume that γ^\dagger does not exceed 2, which means that we discard ternary (or more) emission processes. Let ε_1 be the value such that $\gamma^\dagger(\varepsilon_1) = 1$.

We also consider the possible existence of a sheath potential along the boundary. The sheath potential barrier prevents low energy electrons from reaching the boundary. Its value is determined by equating the electron and ion fluxes at the boundary [7],[11], and in the context of this paper is considered given, equal to $\varepsilon_s \ll \varepsilon_1$. Note that an electron with an energy ε in the bulk of the device has the energy $\varepsilon - \varepsilon_s$ when impinging against the wall. This means that all energies involved in the boundary operators have to be understood translated by an amount ε_s . In particular equation (3.26) translates into

$$\frac{|v'|^2}{2} - \varepsilon_s = \frac{|v|^2}{2} - \varepsilon_s + \frac{|v''|^2}{2} - \varepsilon_s, \quad (3.28)$$

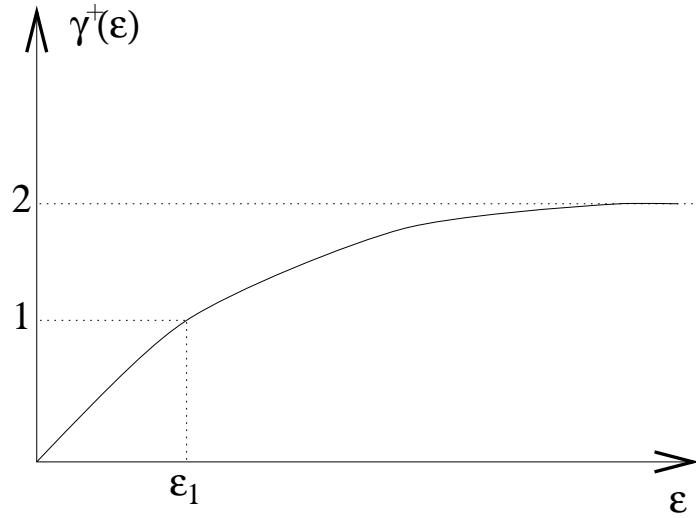


Figure 2: $\gamma^\dagger(\varepsilon)$: mean number of electrons re-emitted by the wall for one incident electron

leading to the fact that the secondary emission process is not energy conservative.

We now determine the values of γ_i^a , γ_i^e , and $\sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon)$ in the three different ranges $0 \leq \varepsilon \leq \varepsilon_s$, $0 \leq \varepsilon - \varepsilon_s \leq \varepsilon_1$, $\varepsilon_1 \leq \varepsilon - \varepsilon_s$. We consider that both walls give rise to the same constants and thus we drop indices i in the sequel. This determination is largely based on phenomenological considerations, since measurements of the microscopic characteristics of the electron-wall interaction are practically out of reach.

case (i) $\varepsilon < \varepsilon_s$: electrons of energy $\varepsilon < \varepsilon_s$ never reach the wall, and are reflected specularly at a small distance from the wall (see figure (3)). This case

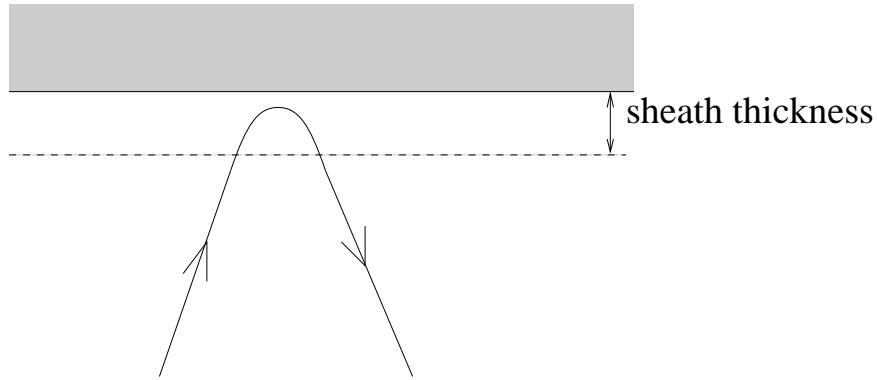


Figure 3: trajectory of an electron of energy $\varepsilon < \varepsilon_s$

implies $\gamma^a(\varepsilon) = 1$, $\gamma^e(\varepsilon) = 0$, $\sigma(\varepsilon \mapsto \varepsilon') = 0$, $\forall \varepsilon' < \varepsilon$, and, by (3.21),

$\mathbb{D}(z, \varepsilon) = +\infty$. This is clear since, when only specular reflection occurs there is no scattering mechanism able to drive the system towards a macroscopic equilibrium. To overcome this problem which only happens at very small energies (ε_s is smaller than any other characteristic energy of the problem), we regularize the data by setting :

$$\gamma^a(\varepsilon) = 1 - \kappa, \gamma^e(\varepsilon) = \kappa, \sigma(\varepsilon \mapsto \varepsilon') = 0, \forall \varepsilon' < \varepsilon \quad (3.29)$$

where $\kappa \ll 1$ is a small but strictly positive constant.

case (ii): $0 \leq \varepsilon - \varepsilon_s \leq \varepsilon_1$: In this case the mean number $\gamma^\dagger(\varepsilon - \varepsilon_s)$ of electrons re-emitted at the wall for one incident electron of energy ε (outside the sheath) is smaller than 1 (see figure (2)). In such a situation, we suppose that either elastic diffuse reflexion or attachment can occur and we discard specular reflexion and secondary emission. This implies :

$$\gamma^a(\varepsilon) = 0, \gamma^e(\varepsilon) = \gamma^\dagger(\varepsilon - \varepsilon_s), \sigma(\varepsilon \mapsto \varepsilon') = 0, \forall \varepsilon' < \varepsilon \quad (3.30)$$

case (iii): $1 \leq \varepsilon - \varepsilon_s$: In this case the mean number $\gamma^\dagger(\varepsilon - \varepsilon_s)$ of electrons re-emitted at the wall is larger than 1. We thus suppose that either elastic diffuse reflexion or secondary emission can occur, and we discard specular reflexion or attachment. This implies :

$$\gamma^a(\varepsilon) = 0, \gamma^e(\varepsilon) = 2 - \gamma^\dagger(\varepsilon - \varepsilon_s), \gamma^s(\varepsilon) = 2(\gamma^\dagger(\varepsilon - \varepsilon_s) - 1) \quad (3.31)$$

where $\gamma^s(\varepsilon)$ is the mean number of electrons re-emitted by secondary emission for one incident electron at the wall, given by

$$\gamma^s(\varepsilon) = \int_{\substack{|v'| < |v| \\ \sigma_i v'_r < 0}} S_i(v \mapsto v') \left| \frac{v'_r}{v_r} \right| dv' \quad (3.32)$$

and only depends on ε if S_i is assumed isotropic, which we now suppose. For secondary emission, the knowledge of $\gamma^s(\varepsilon)$ is not sufficient to fully determine the scattering cross section σ . Additionally, we suppose that there is a maximal “energy share ratio” χ , $0 \leq \chi \leq 1/2$, such that an incident electron of energy ε' at the wall gives rise by secondary emission to one electron of energy ε such that $\varepsilon \in [(1-\chi)\varepsilon', \varepsilon']$ and one electron of complementary energy $\varepsilon'' = \varepsilon' - \varepsilon \in [0, \chi\varepsilon']$. Furthermore, we assume that the probability of the process is uniform for ε in the range $\varepsilon \in [(1-\chi)\varepsilon', \varepsilon']$ (and is null if $\varepsilon \in [\frac{1}{2}\varepsilon', (1-\chi)\varepsilon']$). This assumption and the reciprocity relation (3.27) give rise, using the translation by the sheath potential (3.28), to the following formula :

$$\sigma(\varepsilon' \mapsto \varepsilon) = \frac{(\gamma^\dagger(\varepsilon' - \varepsilon_s) - 1)}{\eta^2 \chi} \cdot \frac{\varepsilon'}{\varepsilon' - \varepsilon_s} \cdot \mathbb{I}_I(\varepsilon - \varepsilon_s) \quad (3.33)$$

with \mathbb{I}_I the characteristic function of the interval $I = [0, \chi(\varepsilon' - \varepsilon_s)] \cup [(1-\chi)(\varepsilon' - \varepsilon_s), \varepsilon' - \varepsilon_s]$.

Obviously, in cases (ii) and (iii), the data (3.30), (3.31) satisfy the scaling hypotheses (2.13) (i.e. $\gamma^e(\varepsilon) = 1 - \mathcal{O}(\eta^2)$ and $\gamma^s(\varepsilon) = \mathcal{O}(\eta^2)$) only for energies close to ε_1 . However, numerical results (see next section) seem to indicate that the approach is still valid for energies ε far from ε_1 .

An adaptation of formula (3.31) must be made for energies $\varepsilon - \varepsilon_s$ such that $\gamma^\dagger(\varepsilon - \varepsilon_s)$ is close or equal to 2. In this case, no (or almost no) diffuse reflection occur (since all the incoming electrons are absorbed in the secondary emission process) and $\gamma^e(\varepsilon) \approx 0$. Then we again find a divergent diffusion constant $\mathcal{D} \approx +\infty$. However, one of the secondary emitted electron has an energy ε close to that of the incident one ε' since $(1 - \chi)\varepsilon' \leq \varepsilon \leq \varepsilon'$ and in practice χ is quite small ($\chi \approx 1/10$). This re-emitted electron indeed participates to the diffusion, actually of particles of energy ε , but it is a reasonable approximation (since χ is small) to assign its contribution to the diffusion of particles of energy ε' . To this aim we modify the value of γ^e from that given by formula (3.31) and we let

$$\gamma^e(\varepsilon) = 1 \quad \text{for } 1 \leq \varepsilon - \varepsilon_s \quad (3.34)$$

instead of $2 - \gamma^\dagger(\varepsilon - \varepsilon_s)$. Indeed, if this effect is taken into account, there is always one electron to participate to the diffusion, either by elastic diffuse reflection or by secondary emission.

Finally, from (3.24), we have :

$$\overline{\gamma^{inel}}(\varepsilon) = \varepsilon \bar{\gamma}^a$$

Using the values given in (3.29), (3.30) and (3.31), we get :

$$\eta^2 \bar{\gamma}^a(\varepsilon) = \begin{cases} 0 & \varepsilon < \varepsilon_s \\ 1 - \gamma^\dagger(\varepsilon - \varepsilon_s) & \varepsilon_s < \varepsilon < \varepsilon_1 + \varepsilon_s \\ \gamma^\dagger(\varepsilon - \varepsilon_s) - 1 & \varepsilon_1 + \varepsilon_s < \varepsilon \end{cases}$$

3.5 Boundary conditions at $z = 0$ and $z = l$

From the boundary condition (2.7), the most straightforward boundary conditions for N at $z = 0$ and $z = l$ are :

$$N(0, \varepsilon, t) = 0, \quad N(l, \varepsilon, t) = F(\varepsilon) \quad (3.35)$$

However, this condition does not take into account the fact that (2.7) only specifies the incoming distribution function f while N is an energy distribution function, thus involving both incoming and outgoing particles. In other words, condition (3.35) supposes that the outgoing distribution functions are also given by (2.7), which is only a crude approximation.

It is well known in the theory of transport processes (see e.g.[2]) that a better guess is provided by a Robin type boundary condition :

$$N(0, \varepsilon, t) - \eta \Lambda_0(\varepsilon) \left[\left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N \right] (0, \varepsilon, t) = 0 \quad (3.36)$$

$$N(l, \varepsilon, t) + \eta \Lambda_l(\varepsilon) \left[\left(\frac{\partial}{\partial z} - E \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N \right] (l, \varepsilon, t) = F(\varepsilon) \quad (3.37)$$

where $\Lambda_0(\varepsilon)$ and $\Lambda_l(\varepsilon)$ are extrapolation lengths determined from a boundary layer analysis near the boundaries $z = 0$ and $z = l$. Indeed, let us consider the boundary layer problem at $z = 0$ obtained by stretching the z variable through the change of variables $z' = z/\eta$ and retaining only the leading order terms in η . This gives rise to the so-called Milne problem for the stretched distribution function $\chi(z', r, v)$, written according to (dropping the primes) :

$$\begin{cases} v_z \frac{\partial \chi}{\partial z} + v_r \frac{\partial \chi}{\partial r} - B^\eta(z=0, r) \left(v_z \frac{\partial \chi}{\partial v_\theta} - v_\theta \frac{\partial \chi}{\partial v_z} \right) = 0, & z \in [0, +\infty], \\ & r \in [0, 1], v \in \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{B}_i|_{z=0}(\chi) = 0, & i = 0, 1 \\ \chi(z=0, r, v) = \chi_b(r, v), & r \in [0, 1], v \in \mathbb{R}^3, v_z > 0 \end{cases} \quad (3.38)$$

where $\mathcal{B}_i|_{z=0}$ denotes the boundary operators (3.3) with all the data (scattering kernel, accomodation coefficient) evaluated at $z = 0$, and χ_b is (for the time being) an arbitrary boundary data for χ .

Although the following conjecture has not yet been proved to our knowledge, it is very likely to be an easy extension of similar classical results of transport theory [2].

Conjecture 1 (i) *The problem (3.38) admits a unique bounded solution for $(r, z, v) \in [0, 1] \times [0, +\infty] \times \mathbb{R}^3$. This solution has zero net flux of particles of given energy ε , i.e. :*

$$\int_0^1 \int_{S^2} \omega_z \chi(r, z, u\omega) dr d\omega = 0 \quad (3.39)$$

and constant K integral

$$\int_0^1 \int_{S^2} \omega_z \chi D(\widetilde{-B}) dr d\omega = K(u) \text{ independent of } z. \quad (3.40)$$

In (3.40), $D(-B)$ denotes the unique solution of (3.15) with B replaced by $-B$ and for a function $g(\omega_z)$, we defi neg($\widetilde{\omega_z}$) = $g(-\omega_z)$.

(ii) *This unique bounded solution converges exponentially when $z \rightarrow \infty$ towards a constant (only depending on u) :*

$$\chi(r, z, u\omega) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \chi_\infty(u) \text{ exponentially} \quad (3.41)$$

$\chi_\infty(u)$ is a functional of the boundary data χ_b and we denote by $\chi_\infty = \chi_\infty^0[\chi_b]$, where the superscript 0 reminds that we are looking at the boundary layer near $z = 0$.

Then Λ_0 and Λ_l are defined by :

$$\Lambda_0(\varepsilon) = \chi_\infty^0[D(z=0)](\sqrt{2\varepsilon}), \quad \Lambda_l(\varepsilon) = \chi_\infty^l[D(z=l)](\sqrt{2\varepsilon}), \quad (3.42)$$

where D is the solution of (3.15). The exact computation of Λ_0 and Λ_l cannot be done explicitly. However, a common approximation of such problems, known as the Marshak approximation [10] supposes that not only the total z -flux (3.39) is vanishing, but that the half fluxes are constant :

$$\int_0^1 \int_{S^2, \pm \omega_z > 0} \omega_z \chi(r, z, u\omega) dr d\omega = F_\pm(u) \quad (3.43)$$

where $F_\pm(u)$ is independent of z . This assumption leads to an approximation of $\chi_\infty(u)$ by :

$$\chi_\infty(u) = \frac{\int_0^1 \int_{S^2, \omega_z > 0} \omega_z \chi_b(r, u\omega) dr d\omega}{\int_0^1 \int_{S^2, \omega_z > 0} \omega_z dr d\omega} \quad (3.44)$$

With $\chi_b = D$ and using (3.18), we get :

$$\Lambda_0 = \frac{1}{2\pi} \frac{\mathbb{I}D(z=0)}{(2\varepsilon)^{3/2}}, \quad \Lambda_l = \frac{1}{2\pi} \frac{\mathbb{I}D(z=l)}{(2\varepsilon)^{3/2}}, \quad (3.45)$$

A more precise approximation [10] would be obtained by assuming that the outgoing distribution $\chi|_{z=0, v_z < 0}$ is constant in (r, ω) and using the constancy of the K -integral (3.40). However, this leads to rather lengthy computations, which have not yet been completed.

4 Numerical Results

We present some numerical results for the following physical data:

- $L = 4 \text{ cm}$, $R_0 = 3 \text{ cm}$ and $R_1 = 5 \text{ cm}$.
- the electric field is constant, equal to 20 V/cm from the anode to 3 cm inside the device, and grows linearly in the last centimeter such that the total potential is 300 V .
- the magnetic field is approximated as a linear function of z ranging from 2 mT at $z = 0$ to 20 mT at $z = l$.
- the sheath potential is taken constant equal to 5 eV in the whole device.

- the particles are injected at the cathode $z = l$ according to a mono-energetic distribution function at $\varepsilon_0 = 15 \text{ eV}$, i.e. $F(\varepsilon)$ in the boundary condition (2.7) is

$$F(\varepsilon) = \delta(\varepsilon - \varepsilon_0)\nu \quad (4.1)$$

where the constant ν needs not be specified due to the linearity of the problem and to the fact that we only look for a normalized distribution function (see below).

The results are compared with a Monte Carlo simulation of the full transport equation (2.1) in the stationary case (see [3] for a discussion of the Monte Carlo method, and [13] for its application to SPT simulation).

We show comparisons between a stationary version of (3.17) and the Monte Carlo method at three locations of the device: $z = 0.1 \text{ cm}$ (near the anode), $z = 2 \text{ cm}$, and $z = 3.4 \text{ cm}$ (near the cathode).

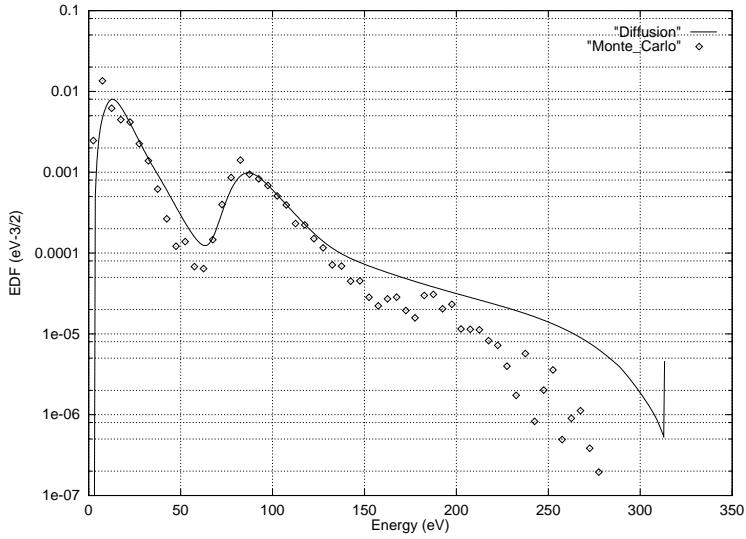


Figure 4: Comparison at $z = 0, 1 \text{ cm}$ from the anode

The figures 4, 5, 6 represent the *normalized* energy distribution functions $N(z, \varepsilon)/N_{tot}(z)$ where $N_{tot}(z) dz$ is the total number of particles in a cross section $[z, z + dz]$ of the device.

The comparison is fairly satisfactory and the simulation of the diffusion model (3.17) requires less than 10 minutes of CPU time. At variance, the Monte Carlo simulation requires more than 1500 minutes on the same machine to reach a sufficient statistics. One notices two peaks in the electron population. The electrons of low energy re-emitted by the wall in the secondary emission phenomena may form the peak observed for energies close to a few eV. One can see that the minima and maxima that distinguish the two populations occur *at the same energies* for both methods.

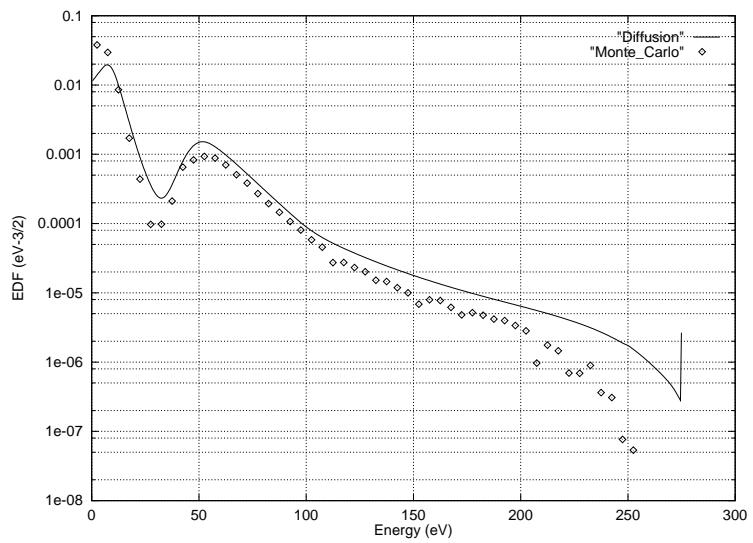


Figure 5: Comparison at $z = 2 \text{ cm}$ from the anode

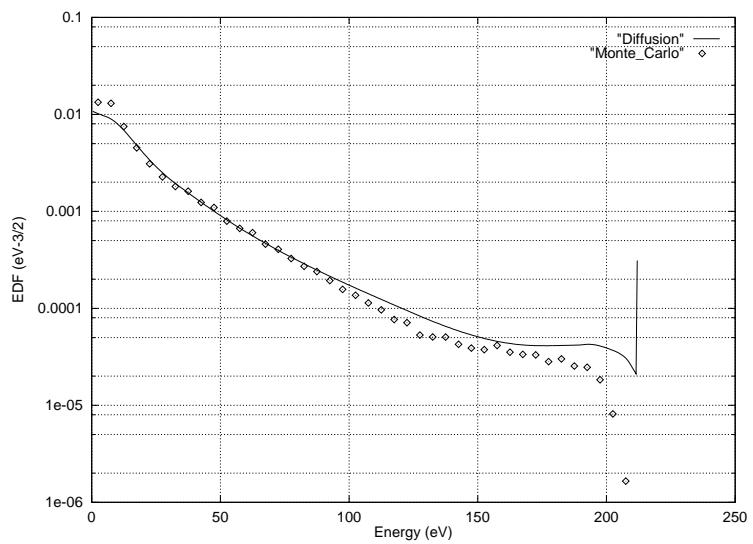


Figure 6: Comparison at $z = 3, 4 \text{ cm}$ from the anode

We also notice that the two methods disagree in regimes where the distribution function is so small that the Monte Carlo averaging is less reliable.

5 Conclusion

We have presented a transport-diffusion model for electrons in a plasma thruster. This model is obtained by a diffusion approximation technique from a kinetic transport equation in which collisions with the wall are the dominant processes. The model includes an account of attachment and secondary emission, together with a correct description of injection and losses at the ends of the device.

Comparisons with Monte Carlo simulation display a good agreement between both methods; our model however requires much lower CPU-time, and opens the way to self-consistent calculation where the electron distribution function is updated while the electric field evolves in time.

The addition of Coulomb scattering by ions inside the thruster together with inelastic processes against neutrals or ions is in progress.

References

- [1] H. Babovsky, C. Bardos et T. Platkowski, Diffusion approximation for a Knudsen gas in a thin domain with accommodation on the boundary, *Asymptotic Analysis*, Vol 3, (1991), 265-289.
- [2] C. Bardos, R. Santos, R. Sentis, Diffusion approximation and computation of the critical size, *Trans. AMS* 284 (1984), pp. 617-649.
- [3] C.K. Birdsall and A.B. Langdon, Plasma physics via computer simulation, IOP, Bristol and Philadelphia, 1991
- [4] A. S. Bober, V. Zhurin, V. Kim, A. S. Koroteev, L. A. Latyshev, E. A. Lyapin, A. I. Morozov, A. H. Popov, Y. Rylov, State of work of electrical thrusters in USSR, 22nd International Electric Propulsion Conference, Viareggio, Italy, October 1991.
- [5] C. Cercignani, R. Illner, M. Pulvirenti, The mathematical theory of dilute gases, Applied Mathematical Sciences vol 106, Springer, New-York, 1994.
- [6] R. Reulet and J.M. Siguier, Mesures du taux d'émission électronique secondaire sur des matériaux diélectriques, CERT-ONERA-report 31/02/94
- [7] F. F. Chen, Introduction to plasma physics, Plenum, New-York, 1974.

- [8] P. Degond, Un modèle de conductivité pariétale : application au moteur à propulsion ionique, *C. R. Acad. Sci. Paris* **322** (1996), pp. 797-802.
- [9] P. Degond, On a model of near wall conductivity and its application to plasma thrusters, to appear in SIAM Journal on Applied Mathematics
- [10] F. Golse, Knudsen layers from a computational viewpoint, *Transport Theory and Statistical Physics* 21(1992), pp. 211-236.
- [11] N. A. Krall and A. W. Trivelpiece, Principles of plasma physics, San-Francisco Press, San-Francisco, 1986.
- [12] A.I. Morozov et A. P. Shubin, Electron kinetics in the wall-conductivity regime I and II, *Sov. J. Plasma Phys.* Vol. 10, No. 6, (1984), 728-735 et Analytic methods in the theory of near-wall conductivity I and II, *Sov. J. Plasma Phys.* Vol. 16, No. 10, (1990), 711-715.
- [13] J.P.Boeuf, L.Garrigues and L.Pitchford, Modeling of a magnetized plasma: the Stationary Plasma Thruster, to be published in NATO ARW on *Electron kinetics and applications of glow discharges*, Plenum Press, 1998

Chapitre 3

Numerical Simulation of Electron Transport in Stationary Plasma Thrusters

Numerical Simulation of Electron Transport in Stationary Plasma Thrusters

V. Latocha^{(1),(2)}, L. Garrigues⁽²⁾, P. Degond⁽¹⁾, J.P. Boeuf⁽²⁾

(1) MIP, UMR 5640 (CNRS-UPS-INSA),
Université Paul Sabatier, 118, route de Narbonne,
F-31062 TOULOUSE cedex
email: degond@mip.ups-tlse.fr, latocha@gmm.insa-tlse.fr

(2) CPAT, CNRS UMR 5002
Université Paul Sabatier, 118, route de Narbonne,
F-31062 TOULOUSE cedex
email: garrigues@cpat.ups-tlse.fr, boeuf@cpat.ups-tlse.fr

Abstract

The aim of this paper is to present and compare the results of two numerical models of electron transport in Stationary Plasma Thrusters, namely a Monte Carlo Simulation and a diffusion model. This paper extends the model of [Transp. Theory Stat. Phys. **27**, 203 (1998)] to the case where elastic and inelastic collisions against atoms are considered as well as collisions with the walls. After describing the extensions, we show numerical results of both models and we compare them in two distinct situations. We conclude by showing that the electron population cannot be assumed Maxwellian in general, but that this assumption would lead to reasonable values for the ionization frequency if the mean energy of the population is known with reasonable accuracy.

PACS numbers: 52., 52.64.-y, 52.65.Pp, 52.75.Di, 52.80.-s, 52.80.Sm, 02.60.Cb

1 Introduction

Stationary Plasma Thrusters (SPTs) are among the most reliable plasma engines used for the attitude control of satellites [1]. Though their thrust is small (10 to 100 mN), they show a very good ratio between the obtained momentum and the ejected mass. Unlike ergol engines they do not use chemical energy to produce a gas expansion but instead, electrical energy to accelerate ionized Xenon. Furthermore, since the involved densities are not very large (10^{13} cm^{-3} for atoms, 10^{11} cm^{-3} for produced ions), SPTs are not subject to severe thermal damage, which strongly contributes to limiting the performances of ergol engines. These features also stimulate the development of more powerful versions of SPT's for interplanetary missions[2].

Like many other types of ion thrusters, the SPT uses ionized Xenon. This gas is inert, can be stored in a supercritic state (which is almost as dense as water without cooling), and has a low ionization potential. In SPT thrusters, electrical power is used to maintain an axial electric field. This field accelerates electrons towards the anode where Xenon atoms are injected. Ionization occurs and the (positive) ions are accelerated towards the exit plane and are ejected. Their recombination with electrons in the plume maintains the satellite electrically neutral. The ionization frequency is increased by means of a radial magnetic field, the intensity of which is designed to confine the electrons without disturbing the ions. The geometry is sketched in figure 1, with the notations that we shall use in this paper.

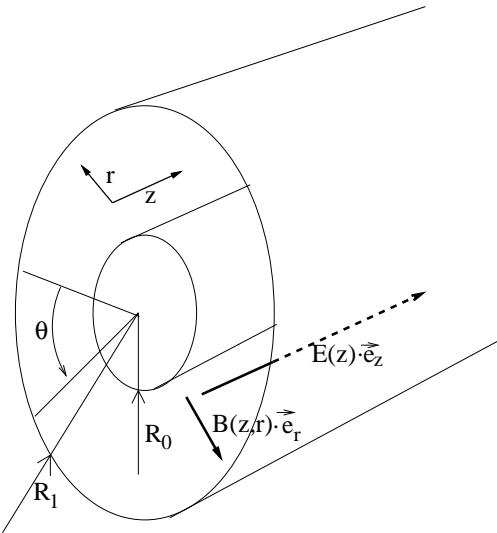


Figure 1: Definitions of variables

A one-dimensional self-consistent transient hybrid model of the SPT-100 acceleration channel has been developed and can reproduce qualitatively some of the features of the SPT (current voltage characteristics, low frequency oscillations, *etc*)[3, 4]. These results are extremely encouraging but the fluid description of the electron transport in

this model is rather simplistic and must be improved. The hybrid model assumes a Maxwellian electron energy distribution function (EDF) to obtain the ionization, momentum and energy loss rates. One way to improve self consistent models of the discharge in the channel of the thruster is to extract informations about EDF's from an accurate description of the electron transport in the SPT. In this paper, we focus on the simulation of the electron transport.

As figure 1 shows, the configuration of the magnetic field is unusual since it is directed *towards* the walls. The radial magnetic field is of the order of 200 G at the exhaust and decreases to values below 10 G near the anode. The Larmor radii of the electrons in this field theoretically range from a few 10^{-2} cm near the exit plane to a few cm near the anode for the most energetic electrons. The $E \times B$ vector is azimuthal and electrons drift around the axis. This motion homogenizes the electron distribution with respect to the angle θ , but cannot produce an axial transport. The axial conductivity originates from collisions between electrons and ions or neutrals, which allow the electrons to jump from one field line to an other one.

Yet, due to a high ionization efficiency, the density of neutrals decreases from a few 10^{13} cm $^{-3}$ at the anode to less than 10^{11} cm $^{-3}$ near the exhaust region in typical operating conditions. Such a density is not large enough to correctly account for the experimentally observed conductivity. Moreover, since the electron temperature is large enough in the exhaust region, the electron-ion collisions have a weak influence on the axial conductivity [3]. Different theories have been proposed to explain the electron transport in the exhaust region of the thruster. The anomalous Bohm diffusion, due to magnetic field turbulence, like in tokamaks [5] or azimuthal electric field fluctuations[6] may give a first plausible explanation to this discrepancy. Morozov *et al.* have postulated that the electron-wall interactions play an important role in the increasing of the axial conductivity ("near-wall conductivity") [7, 8, 9, 10]. This concept considers diffusive reflections of the electrons at the walls, and additional secondary electron emission induced by high energy electrons[11] and diffusive reflections of the electrons at the walls. The goal of this work is to present a numerical model for this regime, based on a diffusion equation.

Two authors of the present paper (Boeuf and Garrigues) have developed a Monte Carlo simulation of the electron population in stationary and smooth electric and magnetic fields, which are provided by an external self-consistent simulation of the SPT. Statistics over a large number (usually several thousands) of electrons can provide satisfactory approximations of the Electron Energy Distribution Function (EEDF), particle and energy fluxes, particle energy and other quantities. Experimental data about EEDF's are difficult to obtain in small devices like the SPTs, but comparisons with existing data have been quite encouraging [12].

Unfortunately the execution time of the code (more than 6 hours on a Compaq ev6 station at 600 Mhz) is much too long for a routine use or for an extension to the unstationary case. Therefore another model has been proposed by one of the authors (Degond) based on a diffusion equation [13]. The model was further developed and a first account of the results in the case of collisions with the walls only (no collisions with ions and neutrals) is encouraging [14]. This model provides the space variation of the EEDF at steady state, for a given 1-D profile of the axial electric field and radial magnetic field; the results can be directly compared with those of the Monte Carlo

simulations.

This paper is devoted to a further development of the model to the case where dominant phenomena are both collisions with the walls and collisions with neutrals. It is organized as follows. In the next section, we give a thorough description of the phenomena which are accounted for in our simulations. In the third section we summarize the main ideas of the Monte Carlo simulation. The derivation of the diffusion model is briefly summarized in section 4. We particularly stress how we account for collisions with neutrals and refer to published results [14] for the case of wall collisions. In the fifth section, we compare the Monte Carlo and diffusion approaches in some typical cases. In the last section we study the validity of hypotheses chosen in order to simplify existing models.

2 Electron Scattering

In the channel of the thruster, the ballistic motion of the electrons is dominated by the rotation about and translation along magnetic field lines. Electrons usually travel from one wall to the other one, but have a high probability of colliding against atoms. They can be reflected by the Debye sheath when they reach the wall. If their energy is large enough, they can interact with the solid surface when they hit the wall.

Due to the configurations of the electric and magnetic fields in the channel, collisions are the key process that produces the diffusion towards the anode.

We shall briefly describe how these phenomena are taken into account in the Monte Carlo model. These hypotheses have been transcribed to the diffusion model so that both models simulate the same problem with the same parameter values. We defer the specific details to each model to the next section.

2.1 Scattering with the wall

In certain regimes, simulations of individual electrons show that the number of collisions with the wall is several times greater than with atoms in gap between walls [12]. Thus, an accurate description of the interaction with the walls is needed. We now describe the phenomena included in the models.

specular reflection Specular reflection is like a mirror reflection for a light beam. In the presence of a Debye sheath, a small (but non negligible) potential repels the slow electrons (those with an energy lower than the sheath potential) away from the wall. Therefore these electrons undergo a specular reflection by the (virtual) wall. The sheath thickness is typically a few times the Debye length λ_d , which is very thin in our conditions (for instance $\lambda_d = 30 \mu\text{m}$ at $T_e = 15 \text{ eV}$ and $n = 10^{12} \text{ cm}^{-3}$). Such a sheath can be treated as an infinitely thin potential jump ε_s which is supposed constant in our simulation.

diffuse reflection We consider elastic interactions with the wall. Electrons which are energetic enough reach the wall and are re-emitted in a random direction with the same energy. The energy lost to win over the sheath potential is gained back when leaving the wall.

inelastic interactions We consider attachment and secondary emission.

To fit our models with data, we consider the mean number of electrons re-emitted by the wall for one impinging electron having a given energy. The secondary electron emission coefficient has been measured on several Nitride Boron ceramics for electron energies ranging from 0 to 400 eV [11]. The experimental results show that, for electron energies less than 30 eV, the secondary electron emission coefficient is less than 1, that is electron attachment to the walls can occur. For incident electron energies higher than 30 eV, this coefficient is greater than 1, indicating that the primary electron can induce secondary electron emission from the dielectric walls.

An important issue in the study of electron secondary emission is the determination of the energy splitting between the incident and the secondary electron. This distribution is quantitatively known only for solids like carbon or aluminium [15] and not for composite elements or ceramics. Inspired by these studies, we have supposed that the energy of the electron ejected from the walls is a little fraction of the energy of the incident electron. In practice, the energy of the new born electron is supposed to be uniformly distributed between 0 and 10% of the primary electron energy.

2.2 Scattering against atoms

During its evolution between two walls, an electron can interact with atoms (elastic or non-elastic scattering). We do not address the problem of deflections by Xe^+ ions in this paper since they do not contribute sufficiently to the axial transport [3]. We simulated elastic scattering, excitation and ionization of Xe , the cross sections of which are taken from Ref. [16]. In order to describe an ionization event, we need to specify how the incoming electron energy is split between the two outgoing electrons. We suppose that the energy which remains after subtraction of the ionization threshold is equally distributed.

Since the electron density is low we neglect electron-electron collisions.

3 Electron Monte Carlo Simulation

The Electron Monte Carlo Simulation (MCS) we have developed allows to follow electron trajectories in the electric and radial magnetic fields configurations that are typical of SPTs. The MCS is a 3D-3v model (three dimensional in configuration space, three dimensional in velocity space). We apply the Monte Carlo technique to simulate the collisions of the electrons (with the walls and atoms), and to take into account electron secondary emission at the dielectric walls as well as ionization. The axial profile of the radial magnetic field is imposed. The axial component of the magnetic field is not considered. The axial variations of the axial electric field are given (can be deduced from 1-d fluid simulations of the SPT). The simulated primary electrons start in the exhaust plane of the Hall thruster at $z = 4$ cm, and $r = 4$ cm. The model runs until all the electrons (the primary and secondary ones, the latter being created

during secondary emission or ionization events) have reached the anode or have been attached to the walls (see below). The electrons are followed one after one during successive time steps. The equations of motion of one particle are resolved using the CYLRAD scheme by Boris [17], which is stable and accurate for $\omega_B \Delta t \leq 0.2$ where $\omega_B = eB/m_e$ is the cyclotron frequency[18]. For an applied magnetic field of 200 G, Δt is of the order of $5 \cdot 10^{-12}$ s. For more details about the discretization, the reader is referred to Hockney *et al.*[17].

At each time step Δt of the electron trajectory we determine the electron-atom collision frequency $\nu_{e-a}(\varepsilon)$, ε being the kinetic energy of the electron. We can obtain an estimation of the collision probability P_m . In our conditions, $P_m < 10^{-2}$, thus the probability can be given by the relation :

$$P_m = \nu_{e-a}(\varepsilon) \Delta t$$

We compare P_m with a pseudorandom number uniformly weighted on the interval $[0, 1]$. If the probability is lower no collision takes place and the electron is followed during the next time step. If a collision is obtained, the velocity and energy of the electrons are determined using standard scattering relations. The nature of this collision is chosen stochastically. The direction of the electron velocity after the collision is again determined stochastically according to the angular cross sections for the considered type of collision. The treatment of electron-atom collisions is described in details by Boeuf and Marode[19].

Because the magnetic field has a large component perpendicular to the walls, the electron current is forced to the dielectric walls of the SPT and the electron-wall interactions play an important role for the axial current. Figure 2 shows an electron trajectory for a constant axial electric field, a purely radial magnetic field and no electron-atoms collision. We can see the azimuthal drift of the electron in the $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$ direction (for this reason, SPTs or Hall thrusters are also called "closed drift thrusters"). Note that in the trajectory displayed in figure 2 there is a magnetic mirror effect due to the $1/r$ variation of the magnetic field. Therefore some electrons cannot reach the internal wall. These electrons do not contribute to the axial conductivity because they cannot drift to the anode. However, if a collision with an atom occurs, the resulting momentum exchange allows the electron to escape the confined trajectory and its diffusion to the anode becomes possible.

Only the electrons which have enough energy to overcome the sheath potential can reach the wall. In the absence of attachment or secondary emission, after hitting the wall they are elastically reflected with a semi-isotropic angular distribution. The angular diffusion results in a change of the electron momentum like in a collision with an ion or an atom. As we can see on figure 3, an electron drift is possible. This group of electrons participate to the axial conductivity.

To simulate the inelastic scattering at the walls, we use uniform random numbers to determine the probability of attachment or secondary electron emission as functions of the mean number of electrons re-emitted by the wall (see section (2.1)).

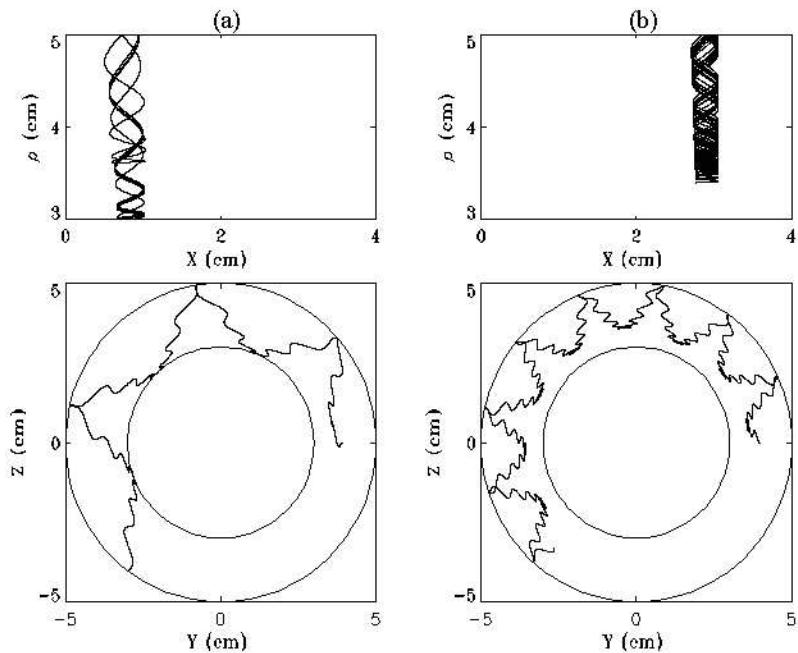


Figure 2: Example of an electron trapped by the sheath in a uniform axial electric field and pure radial magnetic field $B = \frac{R_0}{r}B_0$ with no electron-ion collision. The electron trajectory is projected (upper) in (z, r) plane and (lower) in the (x, y) plane. The electron has not enough energy to overcome the sheath potential and cannot diffuse towards the anode. (a) shows the case $(E = 50 \text{ V/cm}, B_0 = 50 \text{ G})$ and (b) the case $(E = 100 \text{ V/cm}, B_0 = 100 \text{ G})$.

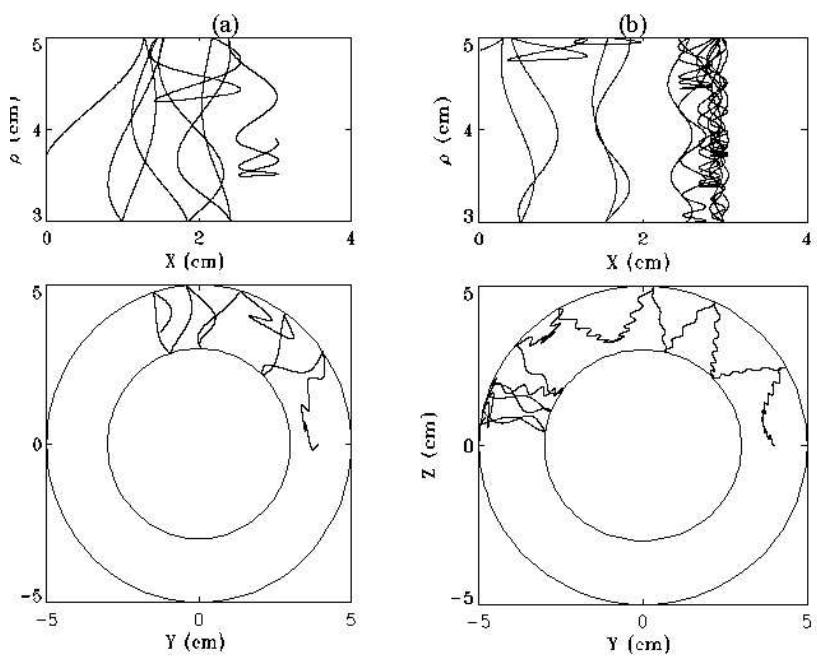


Figure 3: Example of an electron-wall interaction with a diffusive reflection in the same conditions as figure 2. The electron has enough energy to reach the wall and can drift towards the anode.

4 The diffusion model

The particle Monte Carlo method provides an accurate description of electron axial transport in a SPT. However, it is very CPU-time consuming. An alternate method has been proposed by Degond[13] and consists in using a diffusion model. The diffusivity can be derived from an asymptotic analysis of the Boltzmann equation. The model implementation is reported in a previous work[14] and shows satisfactory agreement with results of the Monte Carlo method that was detailed above.

In this paper, the model was fairly unrealistic since only collisions with the walls were considered. In the present paper, we report on the results using this model when both collisions with the wall and collisions with the atoms are considered.

In this section we present the diffusion model and describe how scattering against atoms has been taken into account. We only summarize the results. The details can be found in previous papers[13, 14]. The diffusion model can be derived by means of a suitable scaling limit of the Boltzmann equations. It consists of a diffusion equation for the energy distribution function $N(z, \varepsilon)$ in a given section of the device (located by z). Indeed

$$dN = 4\pi^2 (R_1^2 - R_0^2) \frac{\sqrt{2\varepsilon}}{m^{3/2}} N(z, \varepsilon) d\varepsilon dz \quad (1)$$

represents the number of particles between z and $z + dz$ in the energy range $(\varepsilon, \varepsilon + d\varepsilon)$. Here R_0 and R_1 respectively denote the radii of the inner and outer cylinders, and m is the electron mass.

The model reads

$$-\left(\frac{\partial}{\partial z} - eE\frac{\partial}{\partial \varepsilon}\right) \left[\mathbb{D} \left(\frac{\partial}{\partial z} - eE\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) N(z, \varepsilon, t) \right] = \mathbb{Q}(N), \quad (2)$$

where the diffusivity $\mathbb{D}(z, \varepsilon)$ (which takes into account angular diffusion during collisions) can be computed analytically (see appendix for its expression, or published results in the case where only wall scattering is assumed[13, 14], or when both wall scattering and scattering with atoms are considered[20]).

It must be emphasized that \mathbb{D} depends on the local radial magnetic field $B(z)$ in the considered section. $E = E(z)$ is the local longitudinal electric field and e is the absolute value of the electron charge.

$\mathbb{Q}(N)$ is a scattering operator which takes into account energy diffusion during collision events. Its expression can be found in the appendix.

One can simplify this equation further by considering the total energy variable $W = \varepsilon - e\phi(z)$, $\phi(z)$ being the electrostatic potential ($E = -\frac{\partial\Phi}{\partial z}$). In these new variables, the equation reads

$$-\frac{\partial}{\partial z} \left(\mathbb{D}(z, W) \frac{\partial}{\partial z} N(z, W) \right) = \mathbb{Q}(N)(z, W) \quad (3)$$

If we choose the electric potential to be zero at the exit plane, the total energy of an electron is bounded by $-\phi_{tot} < W < \varepsilon_{in}$ where ε_{in} is the initial energy of the electron when entering the cavity, and ϕ_{tot} is the total electric potential applied to the device. The position variable z ranges in the interval $[0, L]$, where $z = 0$ denotes the anode

and $z = L$ the exit plane. We discretize (3) by a finite difference scheme on a two dimensional mesh in the (z, W) space.

For further details, the reader is referred to Ref. [14,21].

4.1 Scattering with atoms

We refer to section (2) for the list of the considered scattering mechanisms.

As in the previous section, the angular diffusion during scattering events is taken into account in the diffusion coefficient while the energy diffusion appears in the operator $\mathbb{Q}(N)$ at the right hand side of the equation.

In the sequel ε_v will stand for the energy associated with velocity v , that is $\varepsilon_v = m \frac{v^2}{2}$, and $v(\varepsilon) = \sqrt{\frac{2\varepsilon}{m}}$.

4.1.1 Angular diffusion

Angular diffusion is characterized by the relaxation time towards isotropy $\tau(\varepsilon)$. It is given by the inverse of the ‘momentum’ collision frequency

$$\tau(\varepsilon)^{-1} = n_a v(\varepsilon) \int_0^\pi \sigma(\varepsilon, \cos \theta) (1 - \cos \theta) \sin \theta \frac{d\theta}{2} \quad (4)$$

where $\sigma(\varepsilon, \cos \theta)$ is the differential scattering cross section, θ is the scattering angle and n_a is the density of scatterers. In practice, we used the scattering cross sections given by Puech and Mizzi [16].

The total momentum scattering frequency is the sum of the corresponding frequencies of each collision mechanism. Once the total relaxation time towards isotropy $\tau(\varepsilon)$ is known, formula (10) (see appendix) provides the value of the diffusivity \mathbb{D} .

4.1.2 Energy diffusion

Only inelastic collisions contribute to energy diffusion. These are excitation and ionization. Other inelastic processes occur at the wall, namely attachment and secondary emission and are already described in Ref. [14]. Each of these inelastic processes contributes to a specific scattering operator $\mathbb{Q}(N)$.

Excitation In this process, an electron having energy ε_v transfers the excitation energy Δ_{exc} to an atom. As a result the electron leaves with energy $\varepsilon_{v'} = \varepsilon_v - \Delta_{exc}$. The future evolution of the excited atom is not considered in our model.

Assuming that the re-emission after a collision is isotropic, we get [21]:

$$\mathbb{Q}_{exc}(\varepsilon, z) = \sqrt{2\varepsilon} \left(-\nu_{exc}(\varepsilon) N(\varepsilon, z) + \nu_{exc}(\varepsilon + \Delta_{exc}) \sqrt{\frac{\varepsilon + \Delta_{exc}}{\varepsilon}} \cdot N(\varepsilon + \Delta_{exc}, z) \right), \quad (5)$$

where $\nu_{exc}(\varepsilon)$ is the excitation collision frequency.

Ionization In such collisions, one electron with velocity v' impinges on a neutral atom and gives rise to an ion (which is not considered in our model) and to an additional electron.

The energy shared by the two outgoing electrons is the incident electron energy diminished by the ionization threshold Δ_{ion} . Since the splitting of the energy between the two outgoing electrons is not known, we introduce a parameter χ_{ion} which represents the maximal share ratio: the energy ε_{in} left after the collision is equidistributed in the intervals $[0, \chi_{ion} \varepsilon_{in}]$ and $[(1 - \chi_{ion}) \varepsilon_{in}, \varepsilon_{in}]$.

This leads to the following model [21]:

$$\mathbb{Q}_{ion}(N)(z, \varepsilon) = -\nu_{ion}(\varepsilon) \sqrt{2\varepsilon} N(z, \varepsilon) + \int_{\mathbb{J}(\chi_{ion}, \Delta_{ion}, \varepsilon)} A(\varepsilon') N(z, \varepsilon') d\varepsilon', \quad (6)$$

with

$$A(\varepsilon') = \frac{\nu_{ion}(\varepsilon') \sqrt{2\varepsilon'}}{\chi_{ion}(\varepsilon' - \Delta_{ion})}$$

and

$$\mathbb{J}(\chi, \Delta_{ion}, \varepsilon) = \left[\varepsilon + \Delta_{ion}, \frac{\varepsilon}{1 - \chi} + \Delta_{ion} \right] \cup \left[\frac{\varepsilon}{\chi} + \Delta_{ion}, +\infty \right], \quad (7)$$

and where $\nu_{ion}(\varepsilon)$ is the ionization collision frequency.

5 Comparisons between methods

To some extent, the Monte Carlo method is a direct simulation of the Boltzmann equation, while the diffusion model uses an equation derived through a scaling limit of the Boltzmann equation. The former is therefore more physically accurate than the latter. However, both models give similar results, as we are going to show in the present section.

We consider two cases where:

- Inelastic scattering at the wall is not considered, that is only angular diffusion at the walls occurs. As for the channel, elastic scattering against atoms as well as ionization and excitation are simulated.
- Secondary emission and attachment at the walls are also considered.

The case where only wall phenomena are simulated was studied in Ref. [14].

5.1 typical values

The following dimensions are typical of a SPT100: length $L = 4$ cm; internal radius $R_0 = 3$ cm; external radius $R_1 = 5$ cm; electric potential $\Phi_{tot} = 300$ V; magnetic field intensity $B(0) = 20$ G (anode), $B(L) = 200$ G (exit), $B(z)$ interpolating these values according to a parabolic profile; energy of the injected electrons $\varepsilon_{in} = 15$ eV, constant sheath potential $\varepsilon_s = 10$ eV.

We assume constant Xenon density ($2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$). In general, the density profile starts from such high values near the injection point at the anode and then decreases to much lower values at the exit plane, when most of the gas has been ionized. However, in order to simplify the analysis of the results we discard the spatial variation of the Xenon density until paragraph (6.2).

Given a total electric potential, we assumed that the electric field is constant (20 V/cm in our computations) on the three first centimeters from the anode, and linearly growing on the last centimeter. This form was adopted after the results of simulations of a hybrid model with self consistent potential [12].

Attachment and secondary emission are modeled with two parameters $\varepsilon_1 = 30 \text{ eV}$ and $\varepsilon_2 = 110 \text{ eV}$. Attachment occurs for energies of impinging electrons lower than ε_1 and secondary emission always occurs for energies higher than ε_2 [14].

The execution times of the codes vary according to the simulated phenomena. The diffusion model takes between one and two minutes on a workstation (Compaq Alpha EV6, 600 MHz) whereas the Monte Carlo simulation takes between 6 and 24 hours on the same computer, according to collision frequency.

5.2 Normalization of the results

If we denote by $N(z, \varepsilon)$ the energy distribution function of the electrons, we introduce the probability density (according to (1)):

$$f(z, \varepsilon) d\varepsilon = \frac{N(z, \varepsilon) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon}{\int_{\varepsilon \in \mathbb{R}^+} N(z, \varepsilon) \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon}. \quad (8)$$

In our comparisons, we plotted $f(z, \varepsilon)$ and we shall call it the *normalized energy distribution function*.

The other functions displayed are mean values of the energy, and collision frequencies. They read, if h stands for the energy ε or a collision frequency¹ $\nu(z, \varepsilon)$:

$$\langle h \rangle(z) = \int_{\varepsilon \in \mathbb{R}^+} h(z, \varepsilon) f(z, \varepsilon) d\varepsilon, \quad (9)$$

and they come up with the same physical dimension as $h(z, \varepsilon)$.

5.3 Numerical Results

5.3.1 Scattering with atoms only

In this case there are no inelastic phenomena at the wall (only specular and elastic diffuse reflections). This situation was chosen in order to study the influence of collisions against atoms, without any perturbation due to secondary emission and attachment to the walls. In the previous work [14], the Monte Carlo and diffusion models proved to be concordant when all collisions with the walls were simulated (including secondary emission and attachment) but no collision inside the channel was considered. Thus this

¹Since the collision frequency can depend on the density of atoms for instance, z is a variable of this function.

section provides a distinct test of the ability of both models to account for collisions with atoms.

With the diffusion model the execution time is not very sensitive to the nature and number of phenomena taken into account, because the equation does not change (only the value of the coefficient D and the right hand side $Q(N)$ do). At variance, the convergence of the Monte Carlo method can differ significantly. Numerical experiments show that one needs to simulate about 10,000 electrons in order to reach convergence. In this situation, the execution requires about one day of CPU-time on a Compaq Alpha ev6 at 600 MHz, whereas it takes between one and two minutes with the diffusion code.

The results are displayed on figures 4 to 9.

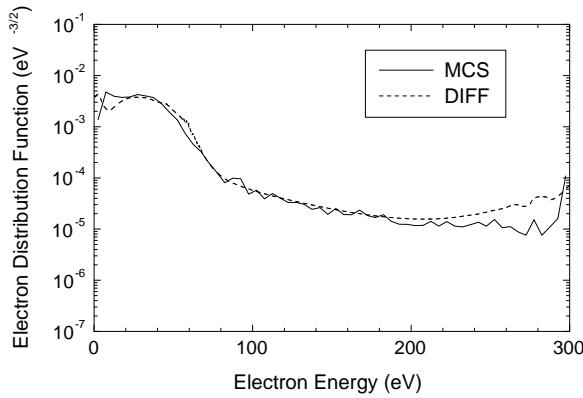


Figure 4: Scattering with atoms only, normalized Electron Energy Distribution Function (EEDF) near the anode

Comparison between results One can see that the agreement is good for the EEDF's over a large range of energies, but the values differ for small energies (less than 10 eV). Elements for the analysis of these results are values and slopes of the EEDF's. While reading the figures, one must bear in mind that the normalization of f (equation (8)) can induce differences that are likely to be observed over the whole range of energies (even if they originate from local discrepancies like e.g. low energy differences). Three situations can happen. The first one is when the agreement is good for all energies, as on figure 6. The second one is the situation on figure 5 for example, where one can observe very similar slopes. However, since the functions must have the same integral (see subsection 5.2) the difference for energies below 20 eV results in a discrepancy for all energies. Eventually, in a third case, differences can compensate and the normalization is not very affected, like on figure 4.

Since the EEDF's are much larger at small energies than in the rest of the energy

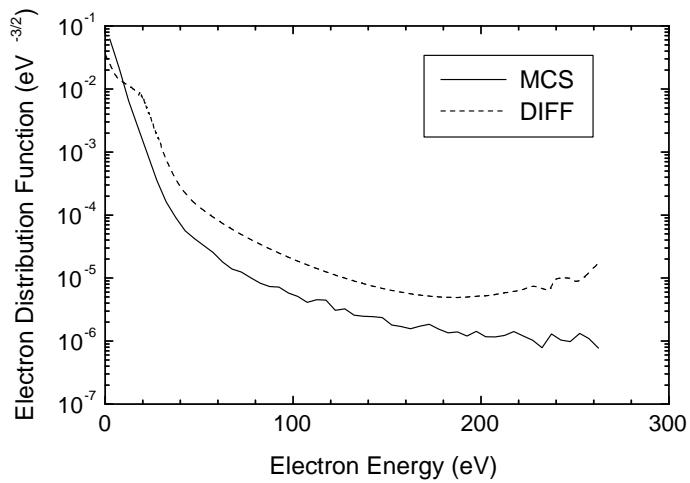


Figure 5: Scattering with atoms only, normalized EEDF at $z = 2 \text{ cm}$ from the anode

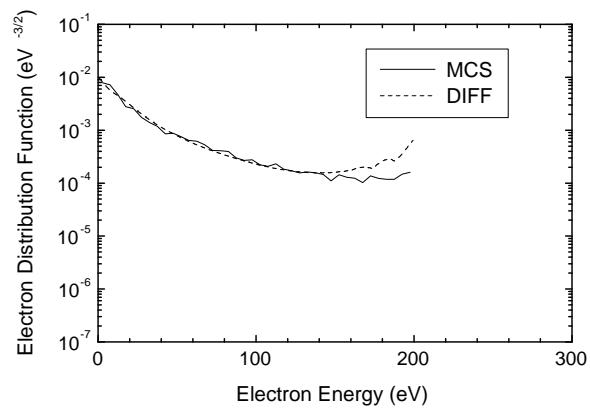


Figure 6: Scattering with atoms only, normalized EEDF at $z = 3, 4 \text{ cm}$ from the anode

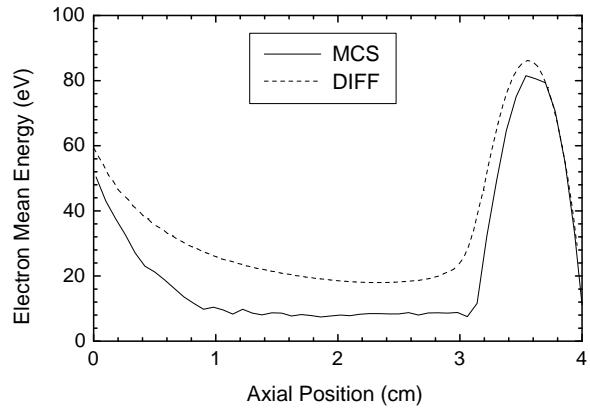


Figure 7: Scattering with atoms only, mean energy along the axis

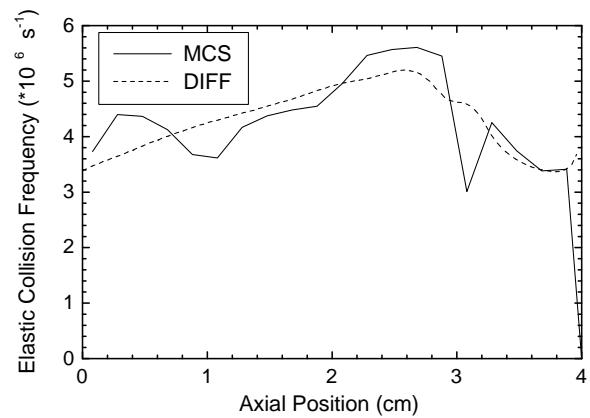


Figure 8: Scattering with atoms only, mean frequency of elastic collision between electrons and atoms

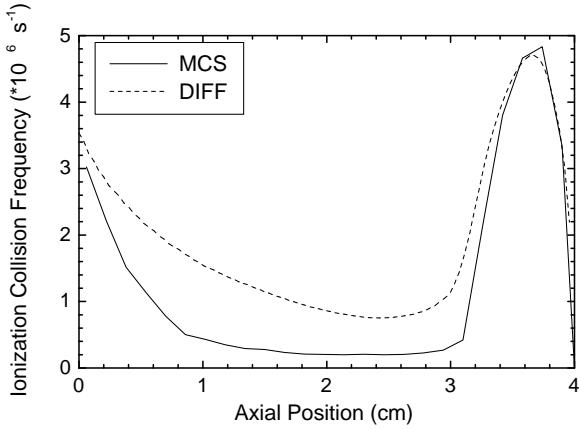


Figure 9: Scattering with atoms only, mean frequency of ionizing collisions

range, the observed differences can significantly affect average values such as the mean energy. However, the predictions of the two models can coincide for average values $\langle h \rangle$ when the weight function h is small in the interval where the discrepancy of the EEDF's is larger. This is actually the case for the mean frequency of elastic collisions between electrons and atoms.

Interpretation of the results The EEDF's displayed on figures 4, 5, 6 reveal some aspects about the nature of the steady state that can exist in a SPT. First, typical electric potentials increase rapidly in the first centimeter just before the exit plane (where the electrons are *ingoing*). Hence, the maximal electron kinetic energy available can reach 200 eV as close as 0.6 cm to the exit plane. Scattering with atoms quickly generates slower electrons (see figure 6), which are dominant in the middle of the channel, as figure 5 shows. One explanation to this relative importance is that electrons having an energy lower than the sheath potential (10 eV in our case) are trapped at the same z (see figure 2), thus increasing their contribution to the EEDF. On the opposite, electrons close to the anode diffuse easily towards it. Since the density of atoms is constant, one can invoke the larger Larmor radius of electrons in this region. Indeed, the intensity of the magnetic field is ten times smaller near the anode than near the exit plane.

Figure 7 shows the variation of the electron mean energy in the channel of the SPT, where we can notice four regions. A first zone in the last 5 mm (close to the cathode) where the large electric field allows the mean energy to increase to its maximum. Between 3 and 3.5 cm, the energy decreases, owing to ionization. During this process, the energy of the impinging electron is diminished by the ionization threshold, and the remaining is shared between two electrons. In the middle of the channel (region from 1 to 3 cm), the gain of energy through the electric field and the loss through ionization

are in balance, hence the mean energy is constant. Eventually, in the first centimeter (close to the anode), the mean energy increases. We conjecture that this phenomenon is due to the influence of the anode, which is supposed to be absorbing.

Both models lead to a nearly constant mean frequency of elastic collisions against atoms (figure 8). This frequency can be written as $\bar{\nu}(z) = N_a(z) \bar{k}(z)$, where \bar{k} denotes the mean momentum exchange rate and N_a is the density of atoms. The latter is constant in the present case, hence the mean momentum exchange rate is nearly constant in the channel. If we estimate its value from results of figure 8, we obtain a rate in the range 1.5 to $2.5 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$. This value is in agreement with the value chosen for the hybrid model ($2.5 \cdot 10^{-7} \text{ cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1}$), which was obtained under the assumption that the electron population is Maxwellian [3]. Other simulations show that this momentum exchange rate is still nearly constant when the density of atoms varies by several orders of magnitude. Hence the mean collision frequency can be considered to be proportional to the gas density in a large number of instances.

5.3.2 Scattering with the atoms and with the wall

In this case we reproduce the physically more realistic situation where all collisions (at the wall as well as inside the channel against atoms) are present. The results are displayed in figures 10 to 14.

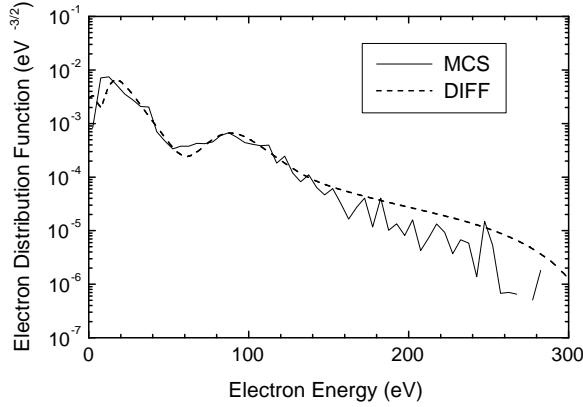


Figure 10: All collisions, normalized EEDF near the anode

Comparison between results As in the preceding case and the one studied in the previous work[14], results show a good agreement for the EEDF's and a similar behaviour for mean quantities. The values given for the frequency of elastic collisions with atoms are particularly close. At variance, the difference is more important for the frequency of ionizing collisions, which is closely related to the mean energy as figures 13 and 14 show. One can observe on figure 13 that the predictions for mean energies coincide well at both ends of the channel but not so well in the interval between 1 and 3 cm from the anode, and so do the curves of ionization frequencies. As we shall show in section (6.1), a good knowledge of the mean energy can be the key to obtain an accurate frequency of ionizing collisions.

Like in the preceding section, the values of the EEDF's are larger at small energies (below 20 eV) than in the rest of the energy range. For this reason, differences arising in this region can have a significant impact on the normalization (see figure 11 for instance) and on average quantities like the mean energy. Note also that the very large values of the calculated electron mean energy in the anode region (see figure 13) are not realistic and are due to the fact that the model is not self consistent.

Interpretation of the results The shapes of the EEDF's presented on figures 10, 11, 12 are typical of simulations taking into account attachment to the walls and secondary emission. The most noticeable feature is the presence of two distinct populations for z

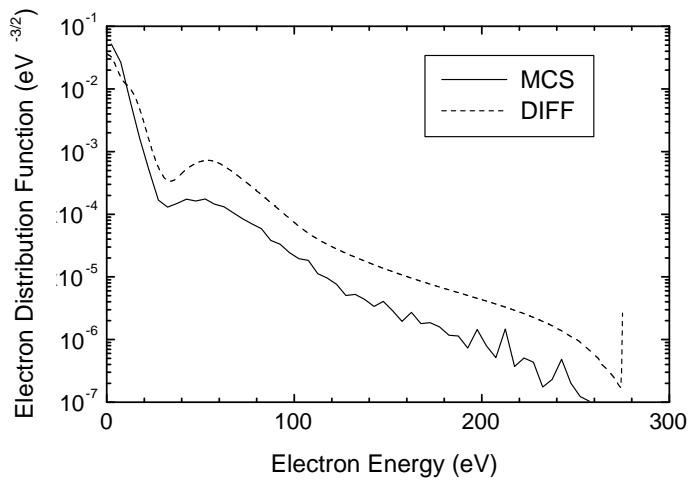


Figure 11: All collisions, normalized EEDF at $z = 2 \text{ cm}$

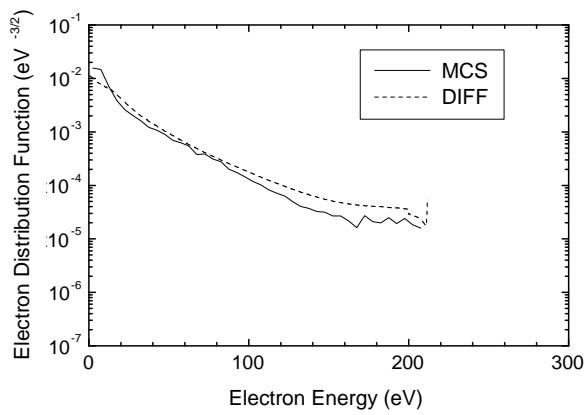


Figure 12: All collisions, normalized EEDF at $z = 3, 4 \text{ cm}$

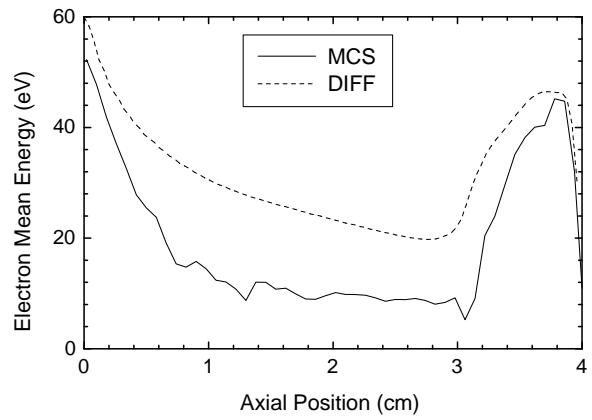


Figure 13: All collisions, mean energy

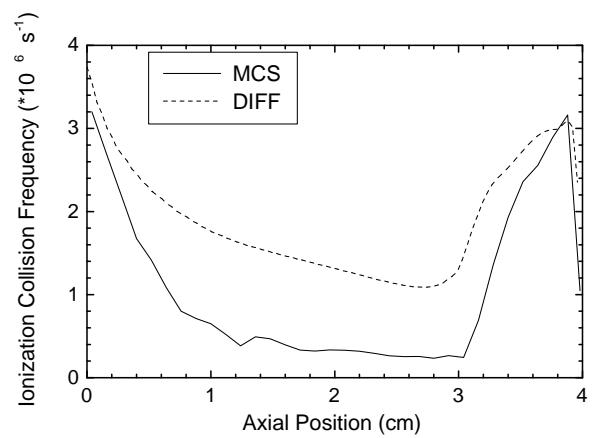


Figure 14: All collisions, mean frequency of ionizing collisions

between 0 (anode) and about 3 cm. Two dimensional representations in the (z, ε) plane show that the energy where these two populations are maximal vary continuously according to the position. It is then difficult to relate these energies to the parameters of wall phenomena (30 eV and 110 eV, see section 5.1). In the analysis of these results, one can consider that electrons having an energy higher than the sheath potential reach the wall, where they are subject to inelastic phenomena. Above this potential, the slower the electron, the higher the probability to be attached. Conversely, high energy electrons induce secondary emission, the secondary electrons being emitted with less than 10 % of the energy of the impinging electron (see section 2.1). In other words, in our model secondary emission produces low energy electrons. The shapes of the EEDF's show the steady state reached as a balance between secondary emission, attachment, and angular diffusion at the walls.

Though the EEDF's are quite different than in the preceding section, the mean energy (figure 13) and the frequency of elastic collisions (not displayed) do not change much. Thus, the remark about the momentum exchange rate (see preceding section) is still valid.

5.4 Reliability of the codes

As we can see from the comparisons, both codes give similar shapes for the EEDF's and average quantities like the mean energy. The variations of the functions are globally the same, thus one can use the diffusion model to predict aspects of the EEDF of electrons at a very reduced computation time.

As for the mean quantities, the plots clearly show that a careful study of low energy electrons should be made if one needs accurate absolute values instead of general behaviours. This study is not straightforward, neither with the Monte Carlo simulations owing to the small number of collisions encountered by such electrons, nor for the diffusion model since the diffusion coefficient is much easier to compute accurately for large energies than for small energies. Indeed, for small energies, the number of terms in the expression of the coefficient and the order of magnitude of these terms can lead to numerical errors. On the contrary, for large energies the diffusion coefficient is asymptotically equivalent to a function whose computation is easy.

Despite these difficulties inherent to one model or the other, they give very similar results for all cases that we studied, which cover a broad range of electric potentials, magnetic field intensities, sheath potentials and electric field shapes.

6 Properties of the electron population

The electron energy distribution function of the electrons provides accurate expressions for the mean collision frequency. We are mainly interested in the ionization frequency, which allows to compute ion creation rates and atom loss rates.

In the present section, we compare ionization collision frequencies computed from the ‘exact’ EEDF (as obtained from our Monte Carlo or diffusion codes) and from a Maxwellian EEDF with the same mean energy. We shall see that, in most cases, the Maxwellian EEDF is good enough, provided the value of the mean energy is correct.

In the first subsection we show that this hypothesis can be adopted upon certain hypotheses on the atom density. In the second subsection, we show that a low density of atoms near the exit plane coincides with the apparition of a beam of high energy electrons. In this situation, macroscopic properties such as the ionization rate are still close.

6.1 Comparison with Maxwellian distributions

In this section, we address the following question : assuming that the electron mean energy is known (e.g. from the results of a fluid model), can we obtain accurate estimates of the Xenon ionization rate if the EEDF is supposed to be Maxwellian. To answer this question, we take the electron mean energy ε_{diff} and ε_{mc} calculated as a function of position z in both models. We then calculate the ionization frequencies in both cases, assuming that the EEDF is Maxwellian, with temperatures equal to $\frac{2}{3}\varepsilon_{diff}$ and $\frac{2}{3}\varepsilon_{mc}$ for each model. Finally, we compare these ionization frequencies with those obtained directly from the models.

Figures 15 for instance shows that these frequencies are close together. Indeed, the ionization frequency is tightly related to the mean energy. Figures 9 and 7 are an example that shows that different mean energies lead to different ionization frequencies, whereas the same mean energy for different distributions (Maxwellian and computed) lead to similar mean frequencies. Thus, one can conjecture that an accurate computation of the mean energy is important to accurately simulate the ionization of atoms.

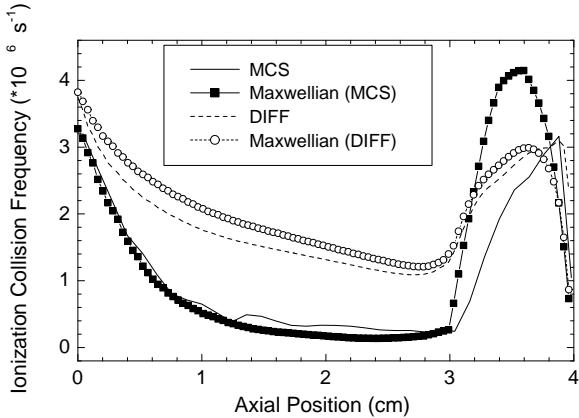


Figure 15: All phenomena, mean frequency of ionizing collisions

Yet, models allowing to accurately predict the mean energy are difficult to obtain in certain conditions, especially when inelastic scattering at the walls are present. As a matter of fact, secondary emission and attachment are highly dependent on the electron distribution and, in certain conditions, they have a strong influence on the mean energy of the population. Hence, the domain of validity of conventional models for the mean energy should be carefully studied.

6.2 Case of realistic atom density

In the previous subsection, the simulations were performed with a constant atom density, equal to $2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, which is rather large. In this subsection we investigate the case where the atom density is low near the exit plane, due to losses by ionization. We used the density as plotted on figure 16, which is typical of SPT's after ignition [3]. We used the diffusion model to compute the EEDF and ionization frequency.

In this situation, the collision frequency against atoms is low in the first centimeter from the exit plane. As observed by Adam and Héron [23], the incident beam of electrons is diffused slowly enough to be seen inside the cavity. We have the same observation in the present case, as figure 17 shows. This population is clearly not Maxwellian and we wanted to test if we can still use a Maxwellian to compute an approximate ionization frequency.

On figure 18, we plotted the ionization frequencies given by the distribution function on the one hand, and by the Maxwellian distribution with the same mean energy on the other hand. Since the density of atoms is much smaller near the exit plane than near the anode, the ionization frequency is small in this region. As we can see, the ionization frequencies are still quite close, which is rather surprising in the region where the distribution is far from being Maxwellian.

7 Conclusion

We have compared the results from a diffusion model based on a simplified form of the Boltzmann equation and a Monte Carlo simulation of electron transport in the $E \times B$ field of a Stationary Plasma Thruster.

The execution time of the diffusion model is several hundred times faster than the Monte Carlo simulation. We showed that the results are comparable, thus providing an interesting alternative for computing electron energy distribution functions in Stationary Plasma Thrusters.

The results also show that the electron energy distribution function in the SPT is not Maxwellian in general. In spite of this, the mean ionization frequency associated with the calculated distribution in the SPT channel is not far from the ionization frequency calculated assuming a Maxwellian distribution with the same mean electron energy. This suggests that simple self-consistent models of the SPT where the electron energy equation is properly taken into account could provide reasonable predictions even though they assume Maxwellian electron distribution functions. Note however that the discrepancy between the ionization frequencies obtained from the calculated electron distribution and from a Maxwellian distribution increases in the exhaust region when the neutral atom density is strongly depleted. In any case, the qualitative and quantitative uncertainty in the mechanisms of electron transport (wall collisions or anomalous conductivity) makes it difficult to accurately describe the electron energy balance in this region with a kinetic model as well as with a fluid model.

Because of its short execution time compared to a Monte Carlo simulation, the diffusion model can be considered as a valuable tool for either testing simplifying assumptions or energy models, for coupling with a fully self-consistent simulation of the SPT, or for comparisons with experiments.

Acknowledgments: The authors wish to thank the network CNRS/CNES/SNECMA/ONERA No. 2232 ‘Propulsion à Plasma pour les Systèmes Spatiaux’ for its support. This work has also been supported by the TMR network No. ERB FMBX CT97 0157 on ‘Asymptotic methods in kinetic theory’ of the European Community.

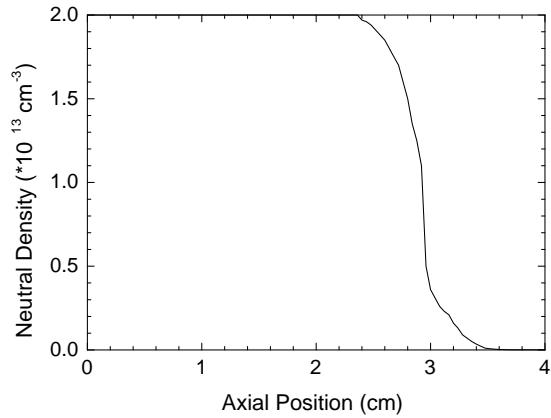


Figure 16: Density of Xe typical of SPT's. The atoms are ionized during their travel through the cavity. The more efficient the ionization, the smaller the density on exit.

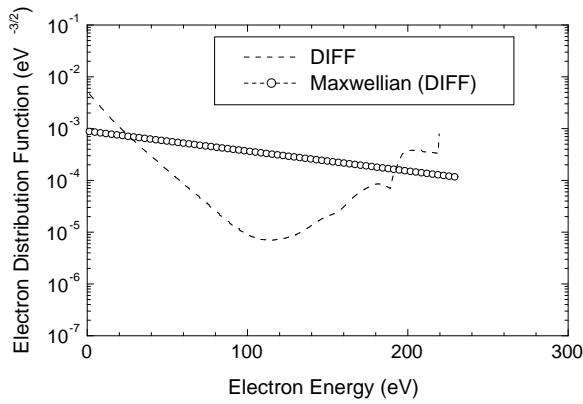


Figure 17: Presence of a beam of electrons of high energy (EEDF at $z = 3.4\text{ cm}$). At this point, the tail of the distribution is very important and the distribution is clearly not Maxwellian.

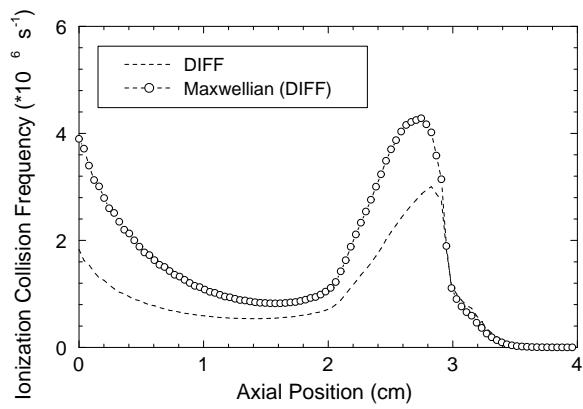


Figure 18: Ionization Frequencies for the computed distribution function, and for the Maxwellian with the same mean energy (logscale). The closeness of the values are particularly surprising for $z > 3.4 \text{ cm}$, where the population has two distinct groups.

References

- [1] Cadiou, A., Lyszyk, M., and Dudeck, M., "Research and Development on Plasma Thrust-ers in France", International Electric Propulsion Conf., Paper 99-007, October 1999.
- [2] G. Saccoccia, "European Electric Propulsion Activities", 35th AIAA Joint Propulsion Conference, Los Angeles, CA, 1999, paper AIAA-99-2158.
- [3] J.P. Boeuf, and L. Garrigues, "Low Frequency Oscillations in a Stationary Plasma Thruster", Journal of Applied Physics 84, 3541 (1998).
- [4] F. Darnon, L. Garrigues, J.P. Boeuf, A. Bouchoule, and M. Lyszyk, "Spontaneous Oscillations in a Hall Thruster", IEEE Transactions on Plasma Science 27, 98 (1999).
- [5] H.R. Kaufman, "Technology of Closed-Drift Thrusters", AIAA Journal 23, 78 (1985).
- [6] M. Hirakawa and Y. Arakawa, "Numerical Simulation of Plasma Particle Behavior in Hall Thruster", 32nd AIAA Joint Propulsion Conference, Lake Buena Vista, FL, 1996, AIAA-96-3195.
- [7] A.I. Morozov and A.P. Shubin, "Electron Kinetics in the Wall-Conductivity Regime : I", Soviet Journal of Plasma Physic 10, 728 (1984).
- [8] A.I. Morozov and A.P. Shubin, "Electron Kinetics in the Wall-Conductivity Regime : II", Soviet Journal of Plasma Physic 10, 734 (1984).
- [9] A.I. Morozov and A.P. Shubin, "Analytic Methods in the Theory of Near-Wall Conductivity : I", Soviet Journal of Plasma Physic 16, 711 (1990).
- [10] A.I. Morozov and A.P. Shubin, "Analytic Methods in the Theory of Near-Wall Conductivity : II", Soviet Journal of Plasma Physic 16, 713 (1990).
- [11] J.P. Bugeat, "Development of a Second Generation of SPT", 24th International Electric Propulsion Conference, Moscow, Russia, 1995, paper IEPC-95-35.
- [12] Laurent Garrigues, *Modélisation d'un propulseur à plasma stationnaire pour satellites*, thèse de doctorat de l'université Paul Sabatier (in French), Toulouse (1998)
- [13] P. Degond, *A model of near-wall conductivity and its application to plasma thrusters*, SIAM J. on Appl. Math **58**, 1138 (1998)
- [14] P. Degond, V. Latocha, L. Garrigues, J.P. Boeuf, *Electron Transport in Stationary Plasma Thrusters*, Transp. Theory Stat. Phys. **27**, 203 (1998)
- [15] J. Schou, *Secondary Electron Emission from Solids by Electron and Proton Bombardment*, Scanning Microscopy **2**, 607 (1988).

- [16] V. Puech, and S. Mizzi, *Collision Cross Sections and Transport Parameters in Neon and Xenon*, J. Phys. D. **24**, 1974 (1991).
- [17] R.W. Hockney and J.W. Eastwood, in Computer Simulation Using Particle, IOP Publishing Ltd (1988).
- [18] C.K. Birdsall, *Particle-in-Cell Charged-Particle Simulations, plus Monte Carlo Collisions with Neutral Atoms, PIC-MCC*, IEEE Trans. Plasma Sci. **19**, 65 (1991).
- [19] J.P. Boeuf, and E. Marode, *A Monte Carlo Analysis of an Electron Swarm in a Non-uniform Field : The Cathode Region of a Glow Discharge in Helium*, J. Phys. D. **15**, 2169 (1982).
- [20] P. Degond, V. Latocha, S. Mancini, A. Mellet, *Diffusion dynamics of an electron gas confined between two plates*, submitted
- [21] V. Latocha, thèse de doctorat de l'INSA Toulouse, in preparation
- [22] L. Jolivet, and J.-F. Roussel, "Numerical Simulation of Plasma Sheath Phenomenon in Presence of Secondary Electronic Emission", submitted to IEEE Transactions on Plasma Science
- [23] J.C. Adam and A. Héron, reports GDR CNRS/CNES /SNECMA/ONERA No. 2232 "Propulsion à Plasma pour Systèmes Spatiaux", 1998

A Expression of the diffusion coefficient

We give here the expression we used for the diffusion coefficient. The computation can be found in [20]. This expression is valid in the general case where scattering against atoms is considered through relaxation frequencies. We get the expression of the diffusion coefficient in the case of wall collisions only by taking the limit when $\tau \rightarrow +\infty$.

$$\mathbb{D} = \frac{(2\varepsilon)^{3/2}\tau}{3(1 + (B\tau)^2)} + \left(\frac{B\tau}{1 + (B\tau)^2} \right)^2 \cdot \frac{\varepsilon^2}{B^2} \cdot I_1 \quad (10)$$

with $I_1 = \int_0^1 (A_\theta^+ B_\theta^+ + A_z^+ B_z^+ + A_\theta^- B_\theta^- + A_z^- B_z^-) (1 - w^2) dw$.

Like in [14] we considered accommodation coefficients α_0 and α_1 which are the probabilities of a specular reflection for electrons hitting the cylinders at (respectively) R_0 and R_1 . With this notation, and with $b = \frac{B}{\sqrt{2\varepsilon}|\omega_r|}$ we give the expression of the integrand:

$$\begin{aligned} B_\theta^+ &= -\sin(b) - B\tau \cos(b) + B\tau e^\chi \\ B_z^+ &= B\tau \sin(b) - \cos(b) + e^\chi \\ B_\theta^- &= -e^\chi \sin(b) + B\tau e^\chi \cos(b) - B\tau \\ B_z^- &= B\tau e^\chi \sin(b) + e^\chi \cos(b) - 1, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} A_\theta^+ &= -\sin(b) + B\tau \cos(b) \\ &+ \frac{1}{1 - \alpha_0 \alpha_1 e^{-\chi}} (\sin(b)(1 + \alpha_0 e^{-2\chi}) + B\tau \cos(b)(\alpha_0 e^{-2\chi} - 1) + B\tau(1 - \alpha_0)e^{-\chi}) \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} A_z^+ &= -B\tau \sin(b) - \cos(b) \\ &+ \frac{1}{1 - \alpha_0 \alpha_1 e^{-\chi}} (B\tau \sin(b)(1 + \alpha_0 e^{-2\chi}) + \cos(b)(1 - \alpha_0 e^{-2\chi}) + (\alpha_0 - 1)e^{-\chi}) \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} A_\theta^- &= B\tau \\ &+ \frac{1}{1 - \alpha_0 \alpha_1 e^{-\chi}} (\sin(b)(1 + \alpha_1)e^{-\chi} + B\tau \cos(b)(1 - \alpha_1)e^{-\chi} + B\tau(\alpha_1 e^{-2\chi} - 1)) \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} A_z^- &= -1 \\ &+ \frac{1}{1 - \alpha_0 \alpha_1 e^{-\chi}} (B\tau \sin(b)(1 + \alpha_1)e^{-\chi} + \cos(b)(\alpha_1 - 1)e^{-\chi} + 1 - \alpha_1 e^{-2\chi}), \end{aligned} \quad (15)$$

Chapitre 4

Diffusion dynamics of an electron gas confined between two plates

Diffusion dynamics of an electron gas confined between two plates

P. Degond ⁽¹⁾, V. Latocha⁽¹⁾, S. Mancini ⁽²⁾, A. Mellet ⁽¹⁾

(1) MIP, UMR 5640 (CNRS-UPS-INSA), Université Paul Sabatier
118, route de Narbonne, 31062 TOULOUSE cedex, FRANCE
email: degond@mip.ups-tlse.fr, latocha@gmm.insa-tlse.fr, mellet@mip.ups-tlse.fr

(2) Laboratoire d'analyse numérique,
Université Pierre et Marie Curie,
175, rue du chevaleret 75013 PARIS, FRANCE
email: smancini@ann.jussieu.fr

Abstract

We consider electrons constrained to move in the gap between two plane parallel plates, confined by a magnetic field perpendicular to the plates and accelerated by an electric field parallel to them. The electrons are subject to elastic collisions against the solid plates on the one hand and against atoms or ions in the gap between the plates on the other hand. Under the assumption that the dynamics is dominated by the collisions, we derive a diffusion type model for the energy distribution function of the electrons. The present paper is an extension of a previous one [17] where only collisions against the solid boundaries were considered.

Key words: Diffusion approximation, transport equations, accommodation boundary conditions, transport-diffusion equations, Spherical Harmonics Expansion model, Moment method, Hilbert expansion, Onsager relation.

AMS subject classification: 82A40, 82A45, 82A70, 76P05, 76X05.

Acknowledgments: Acknowledgements: This work has been supported by the TMR network No. ERB FMBX CT97 0157 on 'Asymptotic methods in kinetic theory' of the European Community and by the network 'SPARCH' of the Centre National de la Recherche Scientifique.

1 Introduction

In a previous paper [17], we considered electrons constrained to move in the gap between two plane parallel plates, confined by a magnetic field perpendicular to the plates and accelerated by an electric field parallel to them. The electrons were subject to elastic collisions against the solid plates. Under the assumptions that the distance between the plates is small compared with the typical lateral extension of the phenomenon and that the dynamics is dominated by the collisions against the wall, we derived a diffusion type model for the dynamics of the electrons in the lateral directions. This obtained diffusion model is of 'Spherical Harmonics Expansion' (SHE) type as the main macroscopic quantity which is evolved by the model is the energy distribution function. The present paper is an extension of [17] to the case where collisions against atoms or ions in the gap between the plates are considered in addition to collisions against the solid boundaries. The situation so-depicted is typical of certain plasma devices like plasma propellors for satellites (see [10], [20] for more details about these devices, [13], [14] for a formal derivation of these models, [15], for numerical applications and [28], [29] for related physical approaches).

Like in [17], following the formal approach [13], [14], we consider that the ratio (denoted by α) of the distance between the two plates to the typical longitudinal length scale (i.e. along the planes) is small and simultaneously that the magnetic field is large (of order α^{-1}) so that the Larmor radius (or gyration radius in the magnetic field) stays of order unity. Besides, we suppose that the electrons are subject to elastically diffusive collisions when they hit the solid plates i.e. they are reemitted with their incident energy but random velocity directions. In [17], collisions with the boundary was the only source of collisions and particle motion in the gap between the plates was supposed collisionless. We showed that the large time behaviour (on time scales of order α^{-2}) of the particle distribution function is, to leading order, given by $F(\underline{\xi}, \varepsilon, t)$, where $\underline{\xi}$ denotes the longitudinal position variable (i.e. the vector $\underline{\xi}$ is parallel to the plates), $\varepsilon = |v|^2/2$ is the electron kinetic energy (with v the velocity) and t the time. The function F was proved to satisfy a diffusion equation in position and energy space known in the literature as the SHE model (see references below).

In the present paper, we consider the more realistic situation where electrons moving in the gap between the plates can undergo elastic collisions against atoms or ions. These collisions add another source of diffusion which combines in a somehow complex way to collisions with the plates and yield a compound diffusivity in the SHE model. We rigorously prove the convergence of the kinetic model towards the SHE equation when the parameter α tends to 0, and additionally, we provide an explicit expression of the diffusivity in the case of isotropic collisions, which is extremely useful for numerical applications of the model [16], [25]. The proof differs from that of [17] in several instances which will be outlined in the course of the paper.

The SHE model has first been derived by a formal truncation of the Spherical Harmonics Expansion of the Boltzmann equation (hence the terminology). We refer to [5], [12] for applications to semiconductor modeling and [18], [33] for applications to plasmas and discharge physics. In the SHE model, energy diffusion is caused by the combined effects of the electric field and of the collisions. Position and energy diffusions are not indepen-

dent (in other words, the diffusion is degenerate) because total energy is preserved during both free flight and collisions.

A related problem had previously been considered by [1] and [2]. The authors considered a collisionless neutral gas flowing in a thin domain (e.g. the gap between two plane parallel plates) and subject to accommodation at the boundary (i.e. reemission according to a given distribution function after collisions against the solid plates). In this case, since collisions against the boundary were inelastic, the large time dynamics was that of an ordinary diffusion equation in position space only. We refer to [17] for a detailed description of the analogies and differences between this earlier approach and ours. Let us just point out that, in the present plane parallel geometry, the diffusivity of [2] was infinite. This is due to the too large proportion of particles reemitted with velocities tangent to the plates and which travel a very large distance between two encounters with the plates. It was later shown in [8] and in [21], [19] that a logarithmic time rescaling can restore a finite diffusivity. In our case, the diffusivity stays finite without logarithmic time rescaling. This is because Larmor gyration in the magnetic field on the one hand [17] and collisions with atoms on the other hand limit the distance travelled by a particle between two encounters with the plates.

Mathematically, the present problem belongs to the class of diffusion approximation problems for kinetic equations. We refer to [17] for a summary and bibliography of the various mathematical techniques that are used in this area. Let us just mention the important references that are landmarks of this field: [7], [4], [22] as well as [11] for a general exposition of kinetic theory.

The paper is organized as follows. First, an introduction to the kinetic model is given in section 2 and the main result is stated. Then, properties of the collision operators are reviewed in section 3. An existence theorem for the kinetic model is proved in section 4. The convergence of the kinetic model to the SHE model is then investigated in section 5 and some properties of the diffusivity tensor are outlined. Eventually, an explicit formula for the diffusivity in the case of isotropic collision operators is given in section 6 and a short conclusion is drawn in section 7.

2 The kinetic model

We introduce a coordinate system (x, y, z) such that the two solid plates are located at $\{x = 0\}$ and $\{x = 1\}$. The electron gas occupies the domain $X := (x, y, z) \in [0, 1] \times \mathbb{R}^2$. We denote by $\underline{\xi} = (y, z) \in \mathbb{R}^2$ the component of the position vector parallel to the plates. Let $v \in \mathbb{R}^3$ denote the particle velocity. We decompose: $v = (v_x; \underline{v})$, where v_x is the velocity component parallel to the x -axis and $\underline{v} = (v_y, v_z) \in \mathbb{R}^2$ is the component parallel to the plates. The electrons are subject to a magnetic field transverse to the plates $(B(\underline{\xi}), 0, 0)$ and to an electric field parallel to the plates, $(0, E_y(\underline{\xi}), E_z(\underline{\xi})) = (0; \underline{E}(\underline{\xi}))$, where B and \underline{E} are supposed to depend only upon $\underline{\xi}$ due to the divergence-free and curl-free constraints respectively. We shall denote by Θ the domain of phase-space: $\Theta = \{(X, v), X \in [0, 1] \times \mathbb{R}^2, v \in \mathbb{R}^3\}$.

Let $f^\alpha(X, v, t) = f^\alpha(x, \underline{\xi}, v_x, \underline{v}, t)$ denote the electron distribution function, i.e. the

density of particles in an elementary phase-space volume element about the position X and velocity v at time $t > 0$. It obeys the following scaled Boltzmann equation

$$\alpha^2 \frac{\partial f^\alpha}{\partial t} + \alpha (\underline{v} \cdot \nabla_{\underline{\xi}} f^\alpha - \underline{E} \cdot \nabla_{\underline{v}} f^\alpha) + v_x \frac{\partial f^\alpha}{\partial x} - (\underline{v} \times \underline{B}) \cdot \nabla_{\underline{v}} f^\alpha = \mathcal{L} f^\alpha, \quad (4.2.1)$$

where $(\underline{v} \times \underline{B}) = (0, v_z B, -v_y B)$. The scaling parameter α measures the ratio between the microscopic length scale (typically, the distance between the plates) and the macroscopic length scale (typically, the lateral extension of the device in the direction $\underline{\xi}$). Note that the ratio between the microscopic time scale (typically the time elapsed between two encounter with the solid plates) and the macroscopic time scale (i.e. the observation time) is of order α^2 . This ratio between the position and time scales is typical of diffusion processes. We shall see that this is the relevant scaling for the present problem. We also observe that the magnetic and electric field scales are such that the number of particle gyrations under the magnetic field between two encounters with the plates is of order 1, while the acceleration of the particles due to the electric field in the same interval is of order α .

The operator \mathcal{L} models elastic collisions with atoms or ions present in the gap between the two plates. We first introduce the spherical coordinates in velocity space: $v = |v|\omega$, where ω belongs to the unit sphere \mathbb{S}^2 . Then \mathcal{L} is given by:

$$\mathcal{L}(f)(v) = \int_{\omega' \in \mathbb{S}^2} \Phi(\underline{\xi}, \omega, \omega') (f(x, |v|\omega', t) - f(x, |v|\omega, t)) d\omega', \quad (4.2.2)$$

The fact that the integration is carried over a sphere expresses the conservation of energy during an elementary collision which sends the electron from velocity $v = |v|\omega$ to $v' = |v|\omega'$. The factor $\Phi(\underline{\xi}, \omega, \omega')$ is related to the differential scattering cross-section associated with the collision mechanism and is supposed given and smooth. Moreover, Φ may depend on $\underline{\xi}$ as the characteristics of the atoms or ion gases may depend on the spatial coordinate. However, we shall suppose that these characteristics are homogeneous within a given section $\{\underline{\xi} = \text{Constant}\}$ of the device, hence the dependence on $\underline{\xi}$ only.

The scaling of the collision operator is such that the number of elastic collisions with atoms or ions which a given electron suffers between two encounters with the plates is of order unity. We point out that restricting to elastic collisions amounts to neglecting the velocity of the atoms or ions as well as energy transfers between them and the electrons. This limitation could be overcome by considering inelastic collisions. Indeed, our analysis would apply if an inelastic collision operator $\alpha^2 \mathcal{I}(f^\alpha)$ was added as an order α^2 term at the right-hand side of (4.2.1). This scaling is valid as long as energy transfers between electrons and atoms or ions are small, which is usually the case due to the very small electron mass. However, for the sake of simplicity, we shall disregard inelastic collisions in the present work.

Equation (4.2.1) is supplemented with conservative boundary conditions expressing the incoming flux of particles in terms of the outgoing flux. We first need to define the traces of f^α on the boundaries of the domain Θ . Therefore, we consider the boundary $\Gamma = \{0, 1\} \times \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^3$ and the following *incoming* and *outgoing* sets respectively denoted

by Γ^- and Γ^+ :

$$\Gamma^\pm = \{(X, v) \in \Theta, \text{ s.t. } (x = 0 \text{ and } \mp v_x > 0) \text{ or } (x = 1 \text{ and } \pm v_x > 0)\}.$$

Denoting by f_- and f_+ the traces of the distribution function f on the sets Γ^- and Γ^+ , the boundary conditions read as follows:

$$f_- = \mathcal{B}f_+ := \beta \mathcal{J}f_+ + (1 - \beta)\mathcal{K}(f_+), \quad (X, v) \in \Gamma^-, \quad (4.2.3)$$

where the accommodation coefficient $\beta = \beta(x, \underline{\xi}, |v|)$ is such that $0 \leq \beta < 1$. \mathcal{J} is the mirror reflection operator given according by $\mathcal{J}f_+(v) = f_+(v_*)$ where $v_* = (-v_x, v_y, v_z)$ is the specular reflection of the vector v with respect to the boundary. The operator \mathcal{K} operates from functions defined on Γ^+ towards functions defined on Γ^- according to:

$$\mathcal{K}(f_+)(X, v) = \int_{\{\omega' \in \mathbb{S}^2, (X, |v|\omega') \in \Gamma^+\}} K(X, |v|; \omega' \rightarrow \omega) f_+(X, |v|\omega') |\omega'_x| d\omega'. \quad (4.2.4)$$

The dependence of the kernel K with respect to $X = (x; \underline{\xi})$, $x \in \{0, 1\}$, $\underline{\xi} \in \mathbb{R}^2$ and $|v|$ will be omitted, otherwise specified. The quantity $K(\omega \rightarrow \omega) |\omega_x| d\omega$ is the probability than an electron impinging on a plane at a position (y, z) with velocity modulus $|v|$ and velocity direction ω' will be reflected with new velocity angle ω belonging to the solid angle $d\omega$ (and the same velocity modulus). Hence, the boundary condition (4.2.3) states that an electron colliding with the boundary can undergo a mirror reflection with probability β and a diffuse reflection with probability $(1 - \beta)$. The diffuse reflection is obviously elastic as the reflected velocity $v = |v|\omega$ has the same modulus as the incoming one $v' = |v'|\omega$.

The same remark as for the collisions with neutrals atoms or ions can be made here. In realistic physical situations, collisions with the boundary are not elastic. However, there is a range of energies for which the relative energy change is small and can be neglected or accounted for by a (boundary) inelastic collision operator of magnitude α^2 . This occurrence has been considered in [13]. Again, for the sake of simplicity, these inelastic collisions will not be considered here.

In this paper, we investigate the limit $\alpha \rightarrow 0$ of (4.2.1). To avoid the treatment of initial layers, we first assume that the initial data are well prepared:

Hypothesis 2.1 *We suppose that there exists a function F_I such that $f_I(x, \underline{\xi}, v) = F_I(\underline{\xi}, |v|^2/2)$ and that f_I satisfies: $\underline{f} \in L^2(\Theta)$, $(\underline{v} \cdot \nabla_{\underline{\xi}} - \underline{E} \cdot \nabla_{\underline{v}})f_I \in L^2(\Theta)$.*

Then, we prove the following result:

Theorem 2.1 *Under a certain number of hypotheses listed in the following sections, problem (4.2.1), (4.2.2), (4.2.3) admits a solution f^α , for every $\alpha > 0$. Moreover, when α tends to zero, f^α converges to f^0 in the weak star topology of $L^\infty([0, T], L^2(\Theta))$ for any $T > 0$, where $f^0(X, v, t) = F(\underline{\xi}, |v|^2/2, t)$ and $F(\underline{\xi}, \varepsilon, t)$, $\varepsilon = |v|^2/2$ is a distributional solution of the problem:*

$$4\pi\sqrt{2\varepsilon}\frac{\partial F}{\partial t} + \left(\nabla_{\underline{\xi}} - \underline{E}\frac{\partial}{\partial \varepsilon}\right) \cdot \underline{J} = 0, \quad (4.2.5)$$

$$\underline{J}(\underline{\xi}, \varepsilon, t) = -\mathbb{D} \left(\nabla_{\underline{\xi}} - \underline{E}\frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) F(\underline{\xi}, \varepsilon, t), \quad (4.2.6)$$

$$F|_{t=0} = F_I. \quad (4.2.7)$$

The diffusion tensor $\mathbb{D} = \mathbb{D}(\underline{\xi}, \varepsilon)$ is given by

$$\mathbb{D}(\underline{\xi}, \varepsilon) = (2\varepsilon)^{3/2} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \underline{D}(x, \omega; \underline{\xi}, \varepsilon) \underline{\omega} \, dx \, d\omega, \quad (4.2.8)$$

where $\underline{\omega} = (\omega_y, \omega_z)$, $\underline{D} = (D_y, D_z)$, and the 2×2 matrix $\underline{D} \underline{\omega}$ is the tensor product of \underline{D} and $\underline{\omega}$. The functions $D_i(x, \omega; \underline{\xi}, \varepsilon)$ with $i = y, z$ are solutions of the problem

$$-v_x \frac{\partial D_i}{\partial x} + (\underline{v} \times B) \cdot \nabla_{\underline{v}} D_i - \mathcal{L} D_i = \omega_i, \text{ in } \Theta \quad (4.2.9)$$

$$(D_i)_+ = \mathcal{B}^*(D_i)_-, \text{ on } \Gamma \quad (4.2.10)$$

and are unique up to an additive function of $\underline{\xi}$ and ε .

System (4.2.5)-(4.2.6) is the ‘so called’ Spherical Harmonic Equation (SHE) model (see references in the introduction).

The proof of Theorem 2.1 will be divided in the following steps. In the next section, we recall some properties of the collision operators (see [17] for the boundary operator, and [5], [26] for operator \mathcal{L}). In section 4, we prove the existence and uniqueness of the solution f^α of the evolution problem (4.2.1) with boundary conditions (4.2.3). Then, we establish estimates on f^α which show the existence of a weak limit f^0 which additionally does not depend on x and ω . Then, we show that the current converges weakly and we establish equation (4.2.6). Finally, we derive the continuity equation (4.2.5), first for f^α , then letting $\alpha \rightarrow 0$, for its limit f^0 , which concludes the proof.

3 The collision operators

3.1 Collisions with the boundary

The study of the boundary operator \mathcal{B} has been extensively developed in [17]. In the present section, we summarize the main assumptions and results. Let $\mathcal{S}_\pm(x)$, $x = 0, 1$ be the following half-spheres:

$$\mathcal{S}_\pm(0) = \{\omega \in \mathbb{S}^2, \pm \omega_x < 0\}, \quad \mathcal{S}_\pm(1) = \{\omega \in \mathbb{S}^2, \pm \omega_x > 0\}. \quad (4.3.11)$$

Introduce the domain $\mathcal{S} = [0, 1] \times \mathbb{S}^2$, with *incoming* and *outgoing* sets respectively denoted by \mathcal{S}^- and \mathcal{S}^+ and given by $\mathcal{S}^\pm = (\{0\} \times \mathcal{S}_\pm(0)) \cup (\{1\} \times \mathcal{S}_\pm(1))$.

We shall consider L^2 -based functional spaces with the associated inner products on $L^2(\Theta)$, $L^2(\Gamma^+)$ and $L^2(\Gamma^-)$:

$$(f, g)_\Theta = \int_\Theta f g \, d\theta, \quad (f, g)_{\Gamma^\pm} = \int_{\Gamma^\pm} f g |v_x| \, d\Gamma,$$

where $d\theta = dx d\underline{\xi} dv$ is the volume element in phase space, and $d\Gamma = \sum_{x=0,1} d\underline{\xi} dv$ is the surface element. The inner products on $L^2(\mathcal{S})$, $L^2(\mathcal{S}^\pm)$ are defined analogously by:

$$(f, g)_\mathcal{S} = \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} f g(x, \omega) \, dx \, d\omega, \quad (f, g)_{\mathcal{S}^\pm} = \sum_{x=0,1} \int_{\mathcal{S}_\pm(x)} |\omega_x| f g(x, \omega) \, d\omega. \quad (4.3.12)$$

Let us define (as in [17]) the operator Q_+ as the orthogonal projection (for the inner product $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{S}^+}$) of $L^2(\mathcal{S}^+)$ on the space \mathcal{C}^+ of constant functions on each connected component, i.e.:

$$Q_+ f(x, \omega) = \frac{1}{\pi} \int_{\mathcal{S}_+(x)} |\omega_x| f(x, \omega) d\omega, \quad \omega \in \mathcal{S}_+(x), \quad x \in \{0, 1\}, \quad (4.3.13)$$

and the operator P_+ as the orthogonal complement of Q_+ : $P_+ = I - Q_+$. In the same way, we define the operators Q_- and P_- on the space \mathcal{C}^- of constant functions on each connected component of \mathcal{S}^- .

We now list the required assumptions on the operator \mathcal{K} . For that purpose, we consider that the operator \mathcal{K} operates on the variable ω only, i.e. we consider that $x \in \{0, 1\}$, $\xi \in \mathbb{R}^2$ and $|v| > 0$ as parameters.

Hypothesis 3.1 *We assume that the kernel K satisfies the following properties:*

- (o) \mathcal{K} is bounded from $L^2(\mathcal{S}_+(x))$ to $L^2(\mathcal{S}_-(x))$, for any $x \in \{0, 1\}$.
- (i) positivity: $K(\omega' \rightarrow \omega) > 0$,
- (ii) flux conservation: for any $x \in \{0, 1\}$:

$$\int_{\mathcal{S}_-(x)} K(\omega' \rightarrow \omega) |\omega_x| d\omega = 1, \quad (4.3.14)$$

(iii) reciprocity relation:

$$K(\omega' \rightarrow \omega) = K(-\omega \rightarrow -\omega'), \quad \forall \omega \in \mathcal{S}_-(x), \omega' \in \mathcal{S}_+(x), \forall x \in \{0, 1\}. \quad (4.3.15)$$

As proved in ([17]), from Hypothesis 3.1 follows the *normalization identity*: for any $x \in \{0, 1\}$:

$$\int_{\mathcal{S}_+(x)} K(\omega' \rightarrow \omega) |\omega'_x| d\omega' = 1. \quad (4.3.16)$$

and the *Darrozes-Guiraud inequality*: for any $x \in \{0, 1\}$:

$$\int_{\mathcal{S}_-(x)} |f_-(x, \omega)|^2 |\omega_x| d\omega \leq \int_{\mathcal{S}_+(x)} |f_+(x, \omega)|^2 |\omega_x| d\omega. \quad (4.3.17)$$

We consider the adjoint operator \mathcal{K}^* of \mathcal{K} . Obviously, \mathcal{K}^* operates from $L^2(\mathcal{S}_-(x))$ to $L^2(\mathcal{S}_+(x))$ and is given by

$$\mathcal{K}^*(f)(x, \omega) = \int_{\mathcal{S}_-(x)} K(\omega \rightarrow \omega') |\omega'_x| f(x, \omega') d\omega', \quad \omega \in \mathcal{S}_+(x). \quad (4.3.18)$$

Hence, the adjoint operator \mathcal{B}^* of \mathcal{B} operates on the same spaces as \mathcal{K}^* and is given by:

$$\mathcal{B}^* = \beta \mathcal{J}^* + (1 - \beta) \mathcal{K}^*, \quad (4.3.19)$$

where \mathcal{J}^* is the adjoint of \mathcal{J} and is the mirror reflection operator acting from functions defined on $\mathcal{S}_-(x)$ to functions defined on $\mathcal{S}_+(x)$. Additionnally to hypothesis 3.1, we assume that:

Hypothesis 3.2 (i) The operator \mathcal{K} is a compact operator from $L^2(\mathcal{S}^+)$ to $L^2(\mathcal{S}^-)$. Analogously, the operator \mathcal{K}^* is compact from $L^2(\mathcal{S}^-)$ to $L^2(\mathcal{S}^+)$.

(ii) There exists a constant $k < 1$ such that:

$$\|\mathcal{K}P_+\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathcal{S}^+), L^2(\mathcal{S}^-))} \leq k < 1, |v| \in \mathbb{R}^+, \underline{\xi} \in \mathbb{R}^2. \quad (4.3.20)$$

(iii) There exists $\beta_0 < 1$ such that $0 \leq \beta \leq \beta_0 < 1, \underline{\xi} \in \mathbb{R}^2, |v| > 0, x = 0, 1$.

It follows that:

$$\|\mathcal{B}P_+\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathcal{S}^+), L^2(\mathcal{S}^-))} \leq \sqrt{\beta_0 + (1 - \beta_0)k^2} = k_0 < 1. \quad (4.3.21)$$

As consequences of our assumptions, we have (see [17]),

Lemma 3.1 Under Hypotheses 3.1, 3.2, we have:

(i) The Null-Space of $I - \mathcal{J}\mathcal{B}^*$ and of $I - \mathcal{J}^*\mathcal{B}$ are respectively given by:

$$N(I - \mathcal{J}\mathcal{B}^*) = \mathcal{C}^-, \quad N(I - \mathcal{J}^*\mathcal{B}) = \mathcal{C}^+.$$

(ii) \mathcal{B} as an operator from $L^2(\mathcal{S}^+)$ to $L^2(\mathcal{S}^-)$ is of norm 1.

(iii) If $K(\omega' \rightarrow \omega) \geq C > 0$, where C is a constant, then assumption (4.3.20) holds.

Lemma 3.2 Let the projection operators $Q_{\pm}, P_{\pm}, \mathcal{B}$ be defined as above. Then the following equalities hold:

$$\mathcal{B}Q_+ = Q_- \mathcal{B} = \mathcal{J}Q_+ = Q_- \mathcal{J}, \quad \mathcal{B}P_+ = P_- \mathcal{B}. \quad (4.3.22)$$

and similarly (mutatis mutandis) for \mathcal{B}^* .

3.2 Collisions with atoms or ions

The properties of the collision operator \mathcal{L} are fairly classical. We refer to [5], [12], [26] for details of the proofs. We assume that the scattering cross section related quantity Φ satisfies the following:

Hypothesis 3.3 (i) There exist two constants, c_1 and c_2 , such that

$$0 < c_1 \leq \Phi \leq c_2.$$

(ii) Φ is invariant by exchange of v and v' , i.e. for every $\omega, \omega' \in \mathbb{S}^2$,

$$\Phi(\omega', \omega) = \Phi(\omega, \omega').$$

We define:

$$\lambda(\omega) = \int_{\mathbb{S}^2} \Phi(\omega, \omega') d\omega'.$$

Remark that λ may depends on $\underline{\xi}$ and $|v|$. Then, the operator $\mathcal{L}f$ may be split in a 'gain' part \mathcal{L}^+f and a 'loss' part $-\lambda f$:

$$\mathcal{L}f = \mathcal{L}^+f - \lambda f \quad , \quad \mathcal{L}^+f = \int_{\mathbb{S}^2} \Phi(\omega, \omega') f(\omega') d\omega'. \quad (4.3.23)$$

Again, we note that \mathcal{L} can be viewed as an operator acting on functions of ω only. Therefore, the other variables can be treated as simple parameters. We define the space $L^2(\mathbb{S}^2)$ equipped with the usual inner product $(f, g)_{\mathbb{S}^2} = \int_{\mathbb{S}^2} f(\omega)g(\omega) d\omega$. We have [5], [12], [26]:

Lemma 3.3 *If Hypothesis 3.3 holds, then:*

(i) *For every $f, g \in L^2(\mathbb{S}^2)$:*

$$(\mathcal{L}(f), g)_{\mathbb{S}^2} = -\frac{1}{2} \int_{\mathbb{S}^2} \Phi(f' - f)(g' - g) d\omega d\omega'. \quad (4.3.24)$$

(ii) *\mathcal{L} is uniformly bounded, i.e. $\exists M$ such that $\|\mathcal{L}\|_{L^2(\mathbb{S}^2)} \leq M$, independently of X and $|v|$.*

(iii) *\mathcal{L} is self-adjoint, i.e. $(\mathcal{L}f, g)_{\mathbb{S}^2} = (f, \mathcal{L}g)_{\mathbb{S}^2} \quad \forall f, g \in L^2(\mathbb{S}^2)$.*

(iv) *\mathcal{L} is a dissipative operator, i.e. $(\mathcal{L}f, f)_{\mathbb{S}^2} \leq 0$ for every $f \in L^2(\mathbb{S}^2)$.*

(v) *The Null-Space $N(\mathcal{L})$ of \mathcal{L} is the one dimensional space of constant functions*

Moreover, considering the projection operator onto constant functions over the sphere \mathbb{S}^2 , defined for every $f \in L^2(\mathbb{S}^2)$ by :

$$[f] = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} f(\omega) d\omega, \quad (4.3.25)$$

one can derive the following coercivity property and characterization of the range $R(\mathcal{L})$ of \mathcal{L} [5], [12]:

Lemma 3.4 (i) *For every $f \in L^2(\mathbb{S}^2)$,*

$$-(\mathcal{L}f, f)_{\mathbb{S}^2} \geq c_1 4\pi |f - [f]|_{L^2(\mathbb{S}^2)}^2 \quad (4.3.26)$$

(ii) $R(\mathcal{L}) = N(\mathcal{L})^\perp = \{f \in L^2(\mathbb{S}^2), \text{ s.t. } [f] = 0\}$.

4 The evolution problem

The following hypotheses make the transport operator in equation (4.2.1) easily solvable. Some of the regularity assumptions could be relaxed at the expense of technicalities, but we shall avoid them in the present paper.

Hypothesis 4.1 (i) *We assume that $\underline{E} = \underline{E}(\underline{\xi}) \in (W^{1,\infty}(\mathbb{R}^2))^2$ and is independent of t .*
(ii) *We assume that $B = B(\underline{\xi}) \in C^1(\mathbb{R}^2)$ and is independent of t .*
(iii) *We assume that there exists a constant $B_0 > 0$ such that $|B(\underline{\xi})| \geq B_0 > 0$, for every $\underline{\xi} \in \mathbb{R}^2$.*

We define the following operator on $L^2(\Theta)$:

$$\mathcal{A}^\alpha f = \underline{v} \cdot \nabla_{\underline{\xi}} f - \underline{E} \cdot \nabla_{\underline{v}} f + \frac{1}{\alpha} \left(v_x \frac{\partial f}{\partial x} - (\underline{v} \times \underline{B}) \cdot \nabla_{\underline{v}} f \right), \quad (4.4.1)$$

with domain $D(\mathcal{A}^\alpha)$ defined by:

$$D(\mathcal{A}^\alpha) = \{f \in L^2(\Theta), \mathcal{A}^\alpha f \in L^2(\Theta), f_+ \in L^2(\Gamma^+), f_- = \mathcal{B}f_+\}.$$

We denote by \mathcal{A} the bare differential operator (4.4.1) when no indication of the domain is needed. Following [3], [32], we define the spaces:

$$H(\mathcal{A}^\alpha) = \{f \in L^2(\Theta), \mathcal{A}^\alpha f \in L^2(\Theta)\}, \quad (4.4.2)$$

$$H_0(\mathcal{A}^\alpha) = \{f \in H(\mathcal{A}^\alpha), f_- \in L^2(\Gamma_-)\} = \{f \in H(\mathcal{A}^\alpha), f_+ \in L^2(\Gamma_+)\} \quad (4.4.3)$$

Then, from [3], [32], we deduce:

Lemma 4.1 (Green's Formula) *Under Hypothesis 4.1, for f and g in $H_0(\mathcal{A}^\alpha)$ with compact support with respect to v , we have:*

$$(\mathcal{A}^\alpha f, g)_\Theta + (f, \mathcal{A}^\alpha g)_\Theta = \frac{1}{\alpha} ((f_+, g_+)_{\Gamma_+} - (f_-, g_-)_{\Gamma_-}). \quad (4.4.4)$$

It is difficult to show that $D(\mathcal{A}^\alpha)$ is closed for the graph norm $|f|_{\mathcal{A}^\alpha}^2 = |f|_{L^2(\Theta)}^2 + |\mathcal{A}^\alpha f|_{L^2(\Theta)}^2$ because we are lacking a control of $|f_+|_{L^2(\Gamma_+)}^2$ (and more precisely of $|Q_+ f_+|_{L^2(\Gamma_+)}^2$) since \mathcal{B} acts like the identity on the spaces \mathcal{C}^\pm . In [17], following [6], we perturb the boundary operator in order to control $|Q_+ f_+|_{L^2(\Gamma_+)}^2$ and, by passing to the limit in the perturbation parameter, we can show the existence (but not the uniqueness) of a solution of the kinetic problem (4.2.1) (with $\mathcal{L} = 0$), (4.2.3). Since the collision operator \mathcal{L} is a bounded perturbation of the transport operator, the same proof can be applied to the present case without any modification. Therefore, we simply summarize the main steps of the proof (in order to fix the notations) and state the main estimates below. We shall refer to [17] for details.

For $\eta > 0$, we introduce the operator:

$$\mathcal{B}_\eta = \mathcal{B}P_+ + \frac{1}{1+\eta} JQ_+,$$

and the operator $\mathcal{A}_\eta^\alpha = \mathcal{A}$ with domain

$$D(\mathcal{A}_\eta^\alpha) = \{u \in H(\mathcal{A}^\alpha), u_+ \in L^2(\Gamma_+), u_- = \mathcal{B}_\eta u_+\}, \quad (4.4.5)$$

We now have

$$\|\mathcal{B}_\eta\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathcal{S}^+), L^2(\mathcal{S}^-))} < 1, \quad \forall \eta > 0, \quad (4.4.6)$$

It is readily seen that the operator \mathcal{A}_η^α is closed. In [17], we prove that it generates a strongly continuous semigroup of contraction:

Proposition 4.1 \mathcal{A}_η^α , with domain $D(\mathcal{A}_\eta^\alpha)$, is a maximal accretive operator.

Since \mathcal{L} is a bounded perturbation and $-\mathcal{L}$ is accretive, it follows that $\mathcal{A}_\eta^\alpha - \alpha^{-1}\mathcal{L}$ also generates a strongly continuous semigroup of contractions. We point out that $\alpha > 0$ is kept fixed in this part. However, for future use, we shall keep track of the dependences of the various estimates upon α . Then, we apply Hille-Yosida's theorem (see [9]) and get:

Lemma 4.2 For all $\eta > 0$, for all $F_\eta \in D(\mathcal{A}_\eta^\alpha)$, there exists a unique function $f_\eta^\alpha \in \mathcal{C}([0, T]; D(\mathcal{A}_\eta^\alpha)) \cap \mathcal{C}^1([0, T]; L^2(\Theta))$, solution of

$$\alpha \partial_t f_\eta^\alpha + \mathcal{A}_\eta f_\eta^\alpha = \frac{1}{\alpha} \mathcal{L} f_\eta^\alpha, \quad f_\eta^\alpha|_{t=0} = F_\eta \quad (4.4.7)$$

Moreover, we have the following estimates:

$$|f_\eta^\alpha|_{L^2(\Theta)} \leq |F_\eta|_{L^2(\Theta)}, \quad (4.4.8)$$

$$|\alpha \partial_t f_\eta^\alpha|_{L^2(\Theta)} = |(\mathcal{A}_\eta - \alpha^{-1}\mathcal{L}) f_\eta^\alpha|_{L^2(\Theta)} \leq |(\mathcal{A}_\eta - \alpha^{-1}\mathcal{L}) F_\eta|_{L^2(\Theta)}. \quad (4.4.9)$$

We then notice [6]:

Lemma 4.3 Let F_I be as in hypothesis 2.1. There exists a sequence $(F_\eta)_{\eta > 0}$ such that $F_\eta \in D(\mathcal{A}_\eta^\alpha)$ and

$$F_\eta \rightarrow F_I, \quad \mathcal{A}F_\eta \rightarrow \mathcal{A}F_I \quad \text{in } L^2(\Theta) \text{ weak star,}$$

as $\eta \rightarrow 0$.

We now give estimates of the boundary values $|f_\pm|_{L^2(\Gamma^\pm)}$ in terms of $|f|_{\mathcal{A}^\alpha}$ for functions of $D(\mathcal{A}_\eta^\alpha)$. We first state that the projection P_+ of the trace at the boundary of a function of $D(\mathcal{A}_\eta^\alpha)$ is controlled by the graph norm. This is done by evaluating $(\mathcal{A}_\eta^\alpha f, f)_\Theta$ using Green's formula (4.4.4):

Lemma 4.4 If $f \in D(\mathcal{A}_\eta^\alpha)$, then there exists a constant $C > 0$ such that:

$$|P_- f_-|_{L^2(\Gamma^-)}^2 \leq |P_+ f_+|_{L^2(\Gamma^+)}^2 \leq \frac{2\alpha}{1 - k_0^2} (\mathcal{A}^\alpha f, f)_\Theta \leq C\alpha |f|_{\mathcal{A}^\alpha}^2. \quad (4.4.10)$$

We now notice that, if $f \in D(\mathcal{A}_\eta^\alpha)$, then $(1 + \eta)Q_- f_- = JQ_+ f_+$ (thanks to Lemma 3.2 and to the definition of \mathcal{B}_η). Thus, there exists a single function $q(f) = q(x, \xi, |v|)$, $x = 0, 1, \xi \in \mathbb{R}^2, |v| > 0$, such that

$$q = (1 + \eta)Q_- f_-, \quad \text{on } \Gamma^-, \quad q = Q_+ f_+, \quad \text{on } \Gamma^+ \quad (4.4.11)$$

The following estimate is obtained in a similar way as (4.4.10), but using a suitable multiplier prior to the application of Green's formula (4.4.4):

Lemma 4.5 Let $f \in D(\mathcal{A}_\eta^\alpha)$, then:

$$|q(f)|_{L_R^2(\Gamma)}^2 \leq C \left(\alpha |f|_{\mathcal{A}^\alpha}^2 + R |f|_{L^2(\Theta)}^2 \right), \quad (4.4.12)$$

where the family of semi-norms $|\varphi|_{L_R^2(\Gamma)}^2$, for $R > 0$, is defined by:

$$|\varphi|_{L_R^2(\Gamma)}^2 = \int_{\Gamma, |v| \leq R} |v_x| |\varphi|^2 d\Gamma, \quad (4.4.13)$$

and the associated function space is denoted $L_R^2(\Gamma)$.

With all this material, it is now easy to pass to the limit in (4.4.7) as $\eta \rightarrow 0$ and obtain the following existence result and estimates:

Proposition 4.2 Under hypotheses 2.1, 3.1, 3.2, 3.3, 4.1, there exists a solution f^α to problem (4.2.1), (4.2.3), such that $f^\alpha \in L^\infty(0, T; L^2(\Theta))$, $\mathcal{A}f^\alpha \in L^\infty(0, T, L^2(\Theta))$, $P_+f_+^\alpha \in L^\infty(0, T, L^2(\Gamma^+))$, $Q_+f_+^\alpha \in L^\infty(0, T, L_R^2(\Gamma^+))$, for all $R > 0$, and the boundary condition is satisfied in the sense that:

$$P_-f_-^\alpha = \mathcal{B}P_+f_+^\alpha, \quad Q_-f_-^\alpha = \mathcal{J}Q_+f_+^\alpha.$$

Moreover, we have:

$$|f^\alpha|_{C^0([0, T], L^2(\Theta))} \leq |F_I|_{L^2(\Theta)}, \quad (4.4.14)$$

$$|\mathcal{A}^\alpha f^\alpha - \alpha^{-1} \mathcal{L} f^\alpha|_{C^0([0, T], L^2(\Theta))} \leq |\mathcal{A}^\alpha F_I|_{L^2(\Theta)}, \quad (4.4.15)$$

$$\int_0^T |P_+f_+^\alpha(t)|_{L^2(\Gamma^+)}^2 dt \leq C\alpha^2 |F_I|_{L^2(\Theta)}^2, \quad (4.4.16)$$

$$\int_0^T |P_-f_-^\alpha(t)|_{L^2(\Gamma^-)}^2 dt \leq C\alpha^2 |F_I|_{L^2(\Theta)}^2, \quad (4.4.17)$$

$$\int_0^T |q(f^\alpha(t))|_{L_R^2(\Gamma)}^2 dt \leq C_R |F_I|_{\mathcal{A}^\alpha}, \quad \forall R > 0, \quad (4.4.18)$$

$$\int_0^T |f^\alpha - [f^\alpha]|_{L^2(\Theta)}^2 ds \leq -C \int_0^T (\mathcal{L}f^\alpha, f^\alpha)_\Theta ds \leq C\alpha^2 |F_I|_{L^2(\Theta)}^2. \quad (4.4.19)$$

where we denote by $q(f^\alpha) = Q_-f_-^\alpha = \mathcal{J}Q_+f_+^\alpha$.

Proof: Only estimate (4.4.19) does not follow directly from lemmas 4.4 and 4.5. But it is an easy consequence of the coercivity estimate (4.3.26). \blacksquare

5 Convergence towards the asymptotic model

5.1 Weak limit of f^α

As a consequence of Proposition 4.2, as α tends to zero, there exists a subsequence, still denoted by f^α , which converges in $L^\infty(0, T; L^2(\Theta))$ weak star to a function f^0 . Furthermore, using the diagonal extraction process, the subsequence $q(f^\alpha)$ converges to a function $q(x, \underline{\xi}, |v|, t)$ with $x = 0, 1$ in $L^2(0, T, L^2(\Gamma_R))$ weak star for any R , where $\Gamma_R = \{(X, v) \in \Gamma, \text{ s.t. } |v| < R\}$. Also, from (4.4.16), (4.4.17), the traces $P_+ f_+^\alpha$ (resp. $P_- f_-^\alpha$) converge in $L^2(0, T; L^2(\Gamma^+))$ (resp. $L^2(0, T; L^2(\Gamma^-))$), strongly towards zero. Finally, from estimates (4.4.19) we also obtain that the limit function f^0 is independent on ω in Θ , i.e. $f^0 = f^0(x, \underline{\xi}, |v|, t)$.

We now introduce the weak formulation of problem (4.2.1), (4.2.3):

Lemma 5.1 *Let f^α be a solution of problem (4.2.1), (4.2.3) as in proposition 4.2. Then, f^α is a weak solution, i.e. for any test function $\phi \in C_0^1([0, T] \times \Theta)$, compactly supported in Θ such that $\phi(\cdot, \cdot, T) = 0$, we have:*

$$\begin{aligned} & \int_0^T \int_\Theta f^\alpha \left(\alpha \frac{\partial}{\partial t} \phi + (\underline{v} \cdot \nabla_{\underline{\xi}} \phi - \underline{E} \cdot \nabla_{\underline{v}} \phi) \right) dt d\theta + \alpha \int_\Theta f_I \phi|_{t=0} d\theta \\ & + \frac{1}{\alpha} \int_0^T \int_\Theta f^\alpha \left(v_x \frac{\partial}{\partial x} \phi - (\underline{v} \times B) \cdot \nabla_{\underline{v}} \phi + \mathcal{L} \phi \right) dt d\theta \\ & = \frac{1}{\alpha} \left(\int_0^T \int_{\Gamma^+} |v_x| f_+^\alpha (\phi_+ - \mathcal{B}^* \phi_-) dt d\Gamma \right). \end{aligned} \quad (4.5.1)$$

Proof: Multiplying equ. (4.2.1), using the Green Formula (4.4.4) and the boundary conditions (4.2.3) yields equ. (4.5.1). \blacksquare

We now prove that the limit function f^0 does not depend on x nor on ω . By using the collision operator \mathcal{L} , the proof is considerably simpler than in [17].

Lemma 5.2 *The limit function f^0 is a function of $\underline{\xi}, |v|, t$ only, i.e. $f^0 = f^0(\underline{\xi}, |v|, t)$.*

Proof: We already know that f^0 does not depend on ω . In particular we have $\mathcal{L}(f^0) = 0$. Then, multiplying (4.5.1) by α , using a test function ϕ with compact support in Θ , and letting $\alpha \rightarrow 0$, we get:

$$\int_0^T \int_\Theta f^0 \left(v_x \frac{\partial}{\partial x} \phi - (\underline{v} \times B) \cdot \nabla_{\underline{v}} \phi + \mathcal{L} \phi \right) dt d\theta = 0. \quad (4.5.2)$$

This is equivalent to saying that f^0 is a distributional solution of the equation $\mathcal{A}^0 f^0 = \mathcal{L} f^0$, where \mathcal{A}^0 is given by:

$$\mathcal{A}^0 f = v_x \frac{\partial f}{\partial x} - (\underline{v} \times B) \cdot \nabla_{\underline{v}} f. \quad (4.5.3)$$

But $\mathcal{L}f^0 = 0$ and f^0 does not depend on ω , so that $(\underline{v} \times B) \cdot \nabla_{\underline{v}} f^0 = 0$. Thus, f^0 satisfies

$$v_x \frac{\partial f^0}{\partial x} = 0.$$

Hence, f^0 is independent on x too, and is given by $f^0(X, v, t) = f^0(\underline{\xi}, |v|, t)$. \blacksquare

From now on we shall denote $F(\underline{\xi}, \varepsilon, t) = f^0(\underline{\xi}, |v|, t)$, where $\varepsilon = |v|^2/2$ is the kinetic energy.

5.2 Auxiliary equation

This is the part which differs the most substantially from [17] as we shall develop below. Let us define the following operator, for $f \in L^2(\Theta)$:

$$\mathcal{T}f = -v_x \frac{\partial f}{\partial x} + (\underline{v} \times B) \cdot \nabla_{\underline{v}} f = -|v| \omega_x \frac{\partial f}{\partial x} - B \frac{\partial f}{\partial \omega} (e_x \times \omega) \quad (4.5.4)$$

where $\frac{\partial f}{\partial \omega} (e_x \times \omega)$ is the differential of f with respect to $\omega \in \mathbb{S}^2$ acting on the tangent vector to \mathbb{S}^2 , $e_x \times \omega$. Note that we formally have $\mathcal{T} = \mathcal{A}^{0*}$. Nevertheless, we shall avoid this notation, since the determination of the domain $\mathcal{D}(\mathcal{A}^{0*})$ is not clear.

In this section we are concerned with solving the following equation:

$$\mathcal{T}f - \mathcal{L}f = g, \quad f_+ = \mathcal{B}^* f_-, \quad (4.5.5)$$

where g is a given function, which is intended to be equal to ω_y and ω_z . In [17] where $\mathcal{L} = 0$, equ. (4.5.5) reduced to a first order differential equation. Therefore, it was possible to integrate it along the characteristics and to reduce it to a Fredholm fixed point problem for the boundary values of f . This procedure was borrowed from [2]. In the present case, this method is no longer operative, because of the presence of the collision operator \mathcal{L} . The most direct extension of the method of [17] would make use of stochastic trajectories. However, we will rather solve the problem in a deterministic framework.

It is easy to check that \mathcal{T} and \mathcal{L} only operate on the variables $(x, \omega) \in [0, 1] \times \mathbb{S}^2$, leaving $\underline{\xi} \in \mathbb{R}^2$ and $|v| \geq 0$ as parameters. Therefore, we only consider the dependence of f on $(x, \omega) \in \mathcal{S} = [0, 1] \times \mathbb{S}^2$, and assume $|v|$ to be a real positive number. We introduce the following domain:

$$\mathcal{D}(\mathcal{T}) = \{f \in L^2(\mathcal{S}) ; \mathcal{T}f \in L^2(\mathcal{S}), f_- \in L^2(\mathcal{S}^-), f_+ = \mathcal{B}^* f_- \}. \quad (4.5.6)$$

An easy computation shows that if (4.5.5) holds, then we have $\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} g(x, \omega) d\omega dx = 0$. The following proposition asserts that this condition is sufficient to ensure the existence of f :

Proposition 5.1 *For all g in $L^2(\mathcal{S})$ such that*

$$\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} g(x, \omega) d\omega dx = 0, \quad (4.5.7)$$

there exists a unique function f in $\mathcal{D}(\mathcal{T})$, solving (4.5.5) and such that

$$\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} f(x, \omega) d\omega dx = 0. \quad (4.5.8)$$

Furthermore, all solutions in this space are equal to f , up to an additive function of ξ and $|v|$.

Proof: The proof relies on a procedure first developed in [27]. We introduce the operator $T = -|v|\omega_x \frac{\partial}{\partial x} - B \frac{\partial}{\partial \omega}(e_x \times \omega) - \mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{L}$, with domain $\mathcal{D}(T) = \mathcal{D}(\mathcal{T})$. As a first step, we recall that $\mathcal{D}(T)$ is closed for the graph norm $|f|_{L^2} + |T(f)|_{L^2}$. Indeed, we have the following trace estimate, which follows directly from Lemmas 4.4, 4.5:

$$|v| \left(|f_-|_{L^2(\mathcal{S}^-)}^2 + |f_+|_{L^2(\mathcal{S}^+)}^2 \right) \leq C|v| |f|_{L^2(\mathcal{S})}^2 + C |\mathcal{T}f|_{L^2(\mathcal{S})}^2. \quad (4.5.9)$$

From this estimate, using similar methods as for the proof of proposition 4.2, we deduce (see [27] for further details):

Lemma 5.3 *The operator $\mathcal{T} = -|v|\omega_x \frac{\partial}{\partial x} - B \frac{\partial}{\partial \omega}(e_x \times \omega)$ is maximal accretive on the domain $\mathcal{D}(\mathcal{T})$.*

We can now get to the very heart of the proof of proposition 5.1, with the following lemma:

Lemma 5.4 *The range $R(T)$ of the operator T satisfies:*

$$\overline{R(T)} = \left\{ g \in L^2(\mathcal{S}) : \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} g(x, \omega) d\omega dx = 0 \right\}.$$

Proof: By the fact that $\overline{R(T)} = N(T^*)^\perp$, it is equivalent to show that the kernel $N(T^*)$ is reduced to the constant functions on $L^2(\mathcal{S})$. First, notice that since \mathcal{L} is a self adjoint bounded operator, one has

$$T^* = \mathcal{T}^* - \mathcal{L} = |v|\omega_x \frac{\partial}{\partial x} + B \frac{\partial}{\partial \omega}(e_x \times \omega) - \mathcal{L},$$

with $\mathcal{D}(T^*) = \mathcal{D}(\mathcal{T}^*)$, since \mathcal{L} is bounded. The operator \mathcal{T} being maximal accretive (lemma 5.3), its formal adjoint \mathcal{T}^* is also maximal accretive on $\mathcal{D}(T^*)$ (see [9]). Note that we do not need to characterize $\mathcal{D}(T^*)$. Lemma 3.4 then yields for all f in $\mathcal{D}(T^*)$:

$$(T^*f, f)_{L^2(\mathcal{S})} \geq (\mathcal{T}^*f, f)_{L^2(\mathcal{S})} - (\mathcal{L}f, f)_{L^2(\mathcal{S})} \geq 4\pi c_1 |f - [f]|_{L^2(\mathcal{S})}^2$$

Let now f belongs to the Null-Space $N(T^*)$. Then it also belongs to $N(\mathcal{L})$, and thus only depends on x (since on \mathbb{S}^2 the kernel of \mathcal{L} is reduced to the constants, by Lemma 3.3). Now, by the same argument as in the proof of Lemma 5.2, f satisfies,

$$\left(|v|\omega_x \frac{\partial}{\partial x} + B \frac{\partial}{\partial \omega}(e_x \times \omega) \right) f = +|v|\omega_x \frac{\partial}{\partial x} f = 0,$$

which implies that f is also independent of x and is therefore a constant on $\mathbb{S}^2 \times [0, 1]$. Conversely, it is readily seen that the constant functions lie in $N(T^*)$, which concludes the proof of the lemma. \blacksquare

Note that in the same way, we have $N(T) = \mathbb{R}$, and the uniqueness condition (4.5.8) amounts to choose $f \in N(T)^\perp$. We now prove

Lemma 5.5 $R(T)$ is closed in $L^2(\mathcal{S})$.

Proof: Of course, by proving this lemma, we shall also complete the proof of proposition 5.1. Let $(g_n)_{n \in \mathbb{N}}$ be a sequence in $R(T)$ such that:

$$g_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} g \quad \text{in } L^2(\mathcal{S}) \text{ strong,}$$

and let $(f_n)_{n \in \mathbb{N}}$ be the associated sequence in $\mathcal{D}(T) \cap N(T)^\perp$ such that $Tf_n = g_n$. If we prove that $|f_n|_{L^2(\mathcal{S})}$ is bounded, there exists a function $f \in L^2(\mathcal{S})$ such that $f_n \rightharpoonup f$ in L^2 weakly and $Tf_n \rightarrow g$ in L^2 strongly. Thanks to estimate (4.5.9), we then check that $f \in \mathcal{D}(T)$ and thus $g \in R(T)$, which is the result to be proved.

To show that $|f_n|_{L^2(\mathcal{S})}$ is bounded, we proceed by contradiction. Suppose that $|f_n|_{L^2(\mathcal{S})}$ is not bounded. First notice that, up to a subsequence, we have $|f_n|_{L^2(\mathcal{S})} \rightarrow \infty$. Setting $F_n = f_n / |f_n|_{L^2(\mathcal{S})}$, we have:

$$\begin{cases} TF_n \rightarrow 0 & \text{in } L^2(\mathcal{S}) \text{ strongly,} \\ |F_n|_{L^2(\mathcal{S})} = 1, \\ \int_{\mathbb{S}^2} \int_0^1 F_n(x, \omega) dx d\omega = 0, \end{cases} \quad (4.5.10)$$

the last condition following from the choice $f_n \in N(T)^\perp$. This implies $F_n \rightharpoonup F$ weakly in $L^2(\mathcal{S})$. Furthermore, since we have:

$$(TF_n, F_n)_{L^2(\mathcal{S})} \geq 4\pi c_1 |F_n - [F_n]|_{L^2(\mathcal{S})}^2,$$

we deduce from (4.5.10) that $F_n - [F_n] \rightarrow 0$ in $L^2(\mathcal{S})$ strongly.

Writing $F_n = [F_n] + (F_n - [F_n])$, we readily obtain:

$$|F_n|_{L^2(\mathcal{S})}^2 = 1 = |F_n - [F_n]|_{L^2(\mathcal{S})}^2 + |[F_n]|_{L^2(\mathcal{S})}^2,$$

and

$$|[F_n]|_{L^2(\mathcal{S})} \rightarrow 1. \quad (4.5.11)$$

We will have a contradiction if we prove

$$[F_n] \rightarrow 0 \quad \text{in } L^2(\mathcal{S}) \text{ strongly.} \quad (4.5.12)$$

To this purpose, we write, following T. Goudon and F. Poupaud in [24]:

$$\begin{aligned} -\mathcal{T}[F_n] = \omega_x |v| \partial_x [F_n] &= \mathcal{T}(F_n - [F_n]) - \mathcal{T}F_n \\ &= \mathcal{T}(F_n - [F_n]) - T(F_n) - \mathcal{L}(F_n). \end{aligned}$$

Multiplying the equality by ω_x , and integrating with respect to $\omega \in \mathbb{S}^2$ (we recall that $[F_n]$ is constant on \mathbb{S}^2), we get:

$$|v| \left(\int_{\mathbb{S}^2} |\omega_x|^2 d\omega \right) \partial_x [F_n] = \int_{\mathbb{S}^2} \omega_x \mathcal{T}(F_n - [F_n]) d\omega - \int_{\mathbb{S}^2} \omega_x (T(F_n) + \mathcal{L}(F_n)) d\omega. \quad (4.5.13)$$

We now notice that, for all f with sufficient regularity, we have:

$$\int_{\mathbb{S}^2} \omega_x \frac{\partial f}{\partial \omega} (e_x \times \omega) d\omega = 0, \quad \int_{\mathbb{S}^2} \omega_x \mathcal{T} f d\omega = -\frac{\partial}{\partial x} \int_{\mathbb{S}^2} |v| |\omega_x|^2 f d\omega.$$

Therefore, since $F_n - [F_n]$ converges towards 0 in $L^2(\mathcal{S})$, the first term in the right-hand side of (4.5.13) converges to 0 in $H^{-1}([0, 1])$, and the second one obviously strongly converges to 0 in $L^2([0, 1])$. Moreover we obviously have:

$$|v| \int_{\mathbb{S}^2} |\omega_x|^2 d\omega > 0. \quad (4.5.14)$$

Hence $|\partial_x [F_n]|_{H^{-1}([0, 1])}$ tends to 0. Defining $\varphi(x) = \int_0^x [F_n](z) dz$, the last condition (4.5.10) is equivalent to saying that $\varphi \in H_0^1([0, 1])$. Hence we have:

$$-\langle \partial_x [F_n], \varphi \rangle_{H^{-1}, H_0^1} = |[F_n]|_{L^2([0, 1])}^2 \leq |\partial_x [F_n]|_{H^{-1}} |\varphi|_{H_0^1}, \quad (4.5.15)$$

and since $|\varphi|_{H_0^1} \leq C |\partial_x \varphi|_{L^2([0, 1])} = C |[F_n]|_{L^2([0, 1])}$, (4.5.15) yields:

$$|[F_n]|_{L^2([0, 1])} \rightarrow 0, \quad (4.5.16)$$

which contradicts (4.5.11) and ends the proof of Lemma 5.5 as well as that of proposition 5.1. \blacksquare

We notice that the above proof is not constructive. We now give an alternate proof of proposition 5.1 in the case of isotropic collision operators \mathcal{L} and rotationally invariant boundary collision operators \mathcal{K} . This proof is more constructive and is an adaptation of the proof of [17]. However, it cannot be used in the general case. We assume (see [26] for more details):

Hypothesis 5.1 (i) K is rotationally invariant under rotations about the x -axis, i.e. there exists a function $\tilde{K}(\omega_x, \omega'_x, \theta)$ such that:

$$K(\omega' \rightarrow \omega) = \tilde{K}(\omega_x, \omega'_x, \frac{\underline{\omega}}{|\underline{\omega}|} \cdot \frac{\underline{\omega}'}{|\underline{\omega}'|}). \quad (4.5.17)$$

(ii) Φ is constant.

From Hypothesis 5.1 follows that:

$$\mathcal{L}f = \lambda([f] - f), \quad [f] = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} f(\omega) d\omega, \quad \lambda = 4\pi\Phi. \quad (4.5.18)$$

We note that \mathbb{S}^2 can be parametrized by $\omega = (\sigma, \underline{\omega})$, where $\sigma = \omega_x/|\omega_x| \in \{-1, +1\}$. The fact that σ is equal to ± 1 recalls that we need two maps to parametrize the sphere in this way. Next, we note $R_{(x,\sigma)}^+(\underline{\omega})$ the rotation of $\underline{\omega}$ about the x-axis of angle bx , where:

$$b = \frac{B}{|v|\omega_x}, \quad \omega_x = \sigma \sqrt{1 - \omega_y^2 - \omega_z^2}.$$

In other words, $\omega^\dagger = R_{(x,\sigma)}^+(\underline{\omega}) = (\omega_y^\dagger, \omega_z^\dagger)$ is given by:

$$\begin{cases} \omega_y^\dagger = \omega_y \cos bx - \omega_z \sin bx \\ \omega_z^\dagger = \omega_y \sin bx + \omega_z \cos bx \end{cases} \quad (4.5.19)$$

We note that ω^\dagger also depends on $|v|$ and $\underline{\xi}$, but we shall not stress this dependence otherwise needed. Similarly, $R_{(x,\sigma)}^-(\underline{\omega})$ is the rotation of angle $-bx$. We have: $\omega^\dagger = R_{(x,\sigma)}^+(\underline{\omega})$ if and only if $\underline{\omega} = R_{(x,\sigma)}^-(\omega^\dagger)$, and

$$R_{(x',\sigma)}^- R_{(x,\sigma)}^+ = R_{(x-x',\sigma)}^+ = R_{(x'-x,\sigma)}^-.$$

We also define the operator \mathcal{I} such that $\mathcal{I}f(x, \sigma, \underline{\omega}) = f(x, \sigma, -\underline{\omega})$. With hypothesis 5.1, we clearly have:

Lemma 5.6 (i) *The boundary operators \mathcal{B} and \mathcal{B}^* commute with \mathcal{I} :*

$$\mathcal{B}\mathcal{I} = \mathcal{I}\mathcal{B}, \quad \mathcal{B}^*\mathcal{I} = \mathcal{I}\mathcal{B}^*.$$

(ii) *The transport operator \mathcal{T} commutes with \mathcal{I} .*

$$\mathcal{T}\mathcal{I} = \mathcal{I}\mathcal{T}$$

Now, we have the

Lemma 5.7 *Let g be a function such that $\mathcal{I}g = -g$, and suppose that the problem*

$$\mathcal{T}f + \lambda f = g, \quad f_+ = \mathcal{B}^* f_-, \quad \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} f(x, \omega) dx d\omega = 0, \quad (4.5.20)$$

has a unique solution $f \in L^2(\mathcal{S})$. Then, f is the solution of problem (4.5.5) as given by proposition 5.1.

Proof: By uniqueness, we have $\mathcal{I}f = -f$. Therefore, f is odd with respect to $\underline{\omega}$ and consequently $[f] = 0$. Then, it follows that f is also a solution of problem

$$\mathcal{T}f + \lambda f = \lambda[f] + g, \quad f_+ = \mathcal{B}^* f_-, \quad \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} f(x, \omega) dx d\omega = 0,$$

i.e. is the solution of problem (4.5.5) as given by proposition 5.1. ■

We now show

Proposition 5.2 *The problem (4.5.20) has a unique solution $f \in L^2(\mathcal{S})$.*

Proof: Applying the change of variables (4.5.19), equation (4.5.20) reads:

$$-|v|\omega_x \frac{\partial f^\dagger}{\partial x} + \lambda f^\dagger = g^\dagger \quad (4.5.21)$$

where $f^\dagger(x, \sigma, \underline{\omega}^\dagger) = f(x, \sigma, R_{(x, \sigma)}^+(\underline{\omega}^\dagger))$ and $g^\dagger(x, \sigma, \underline{\omega}^\dagger) = g(x, \sigma, R_{(x, \sigma)}^+(\underline{\omega}^\dagger))$. Integrating with respect to x we get:

$$f^\dagger(x, \sigma, \omega^\dagger) = \begin{cases} e^{-\gamma(1-x)} f^\dagger(1, \sigma, \omega^\dagger) + G^\dagger(x, \sigma, \omega^\dagger) , & \sigma = +1 , \\ e^{\gamma x} f^\dagger(0, \sigma, \omega^\dagger) + G^\dagger(x, \sigma, \omega^\dagger) , & \sigma = -1 , \end{cases} \quad (4.5.22)$$

where $\gamma = \lambda/|v|\omega_x$ and G^\dagger is given by

$$G^\dagger(x, \sigma, \omega^\dagger) = \begin{cases} \frac{1}{|v| |\omega_x|} \int_x^1 e^{-\gamma(x'-x)} g^\dagger(x', \sigma, \omega^\dagger) dx' , & \sigma = +1 , \\ \frac{1}{|v| |\omega_x|} \int_0^x e^{\gamma(x-x')} g^\dagger(x', \sigma, \omega^\dagger) dx' , & \sigma = -1 . \end{cases} \quad (4.5.23)$$

Back to the original variables we have:

$$f(x, \sigma, \underline{\omega}) = \begin{cases} e^{-\gamma(1-x)} f_+(1, \sigma, R_{(1-x, \sigma)}^+(\underline{\omega})) + G(x, \sigma, \underline{\omega}) , & \sigma = +1 , \\ e^{\gamma x} f_+(0, \sigma, R_{(x, \sigma)}^-(\underline{\omega})) + G(x, \sigma, \underline{\omega}) , & \sigma = -1 , \end{cases} \quad (4.5.24)$$

where G is defined by

$$G(x, \sigma, \underline{\omega}) = \begin{cases} \frac{1}{|v| |\omega_x|} \int_x^1 e^{-\gamma(x'-x)} g(x', \sigma, R_{(x'-x, \sigma)}^+(\underline{\omega})) dx' , & \sigma = +1 , \\ \frac{1}{|v| |\omega_x|} \int_0^x e^{\gamma(x-x')} g(x', \sigma, R_{(x-x', \sigma)}^-(\underline{\omega})) dx' , & \sigma = -1 . \end{cases} \quad (4.5.25)$$

Note that G also depends on $|v|$ and ξ , and that $f_+(0)$ and $f_+(1)$ have to be determined by means of the boundary conditions. Evaluating (4.5.24) for $x = 0, 1$, we get:

$$f_-(1, \sigma, \underline{\omega}) = e^{-|\gamma|} f_+(0, \sigma, R_{(1, \sigma)}^-(\underline{\omega})) + G_-(1, \sigma, \underline{\omega}) , \quad \sigma = -1 , \quad (4.5.26)$$

$$f_-(0, \sigma, \underline{\omega}) = e^{-|\gamma|} f_+(1, \sigma, R_{(1, \sigma)}^+(\underline{\omega})) + G_-(0, \sigma, \underline{\omega}) , \quad \sigma = +1 , \quad (4.5.27)$$

where,

$$G_-(1, \sigma, \underline{\omega}) = \frac{1}{|v| |\omega_x|} \int_0^1 e^{-|\gamma|(1-x')} g(x', \sigma, R_{(1-x', \sigma)}^-(\underline{\omega})) dx' , \quad \sigma = -1 ,$$

$$G_-(0, \sigma, \underline{\omega}) = \frac{1}{|v| |\omega_x|} \int_0^1 e^{-|\gamma|x'} g(x', \sigma, R_{(x', \sigma)}^+(\underline{\omega})) dx' , \quad \sigma = +1 .$$

Equs. (4.5.26) and (4.5.27) can be written compactly:

$$f_- = M_+ f_+ + G_- \quad (4.5.28)$$

where M_+ is a bounded operator of norm strictly smaller than 1 from $L^2(\mathcal{S}^+)$ onto $L^2(\mathcal{S}^-)$. Now, thanks to the boundary conditions, we have, omitting the dependence on σ and $\underline{\omega}$:

$$\begin{aligned} f_+(1) &= \mathcal{B}_1^* f_-(1) = \mathcal{B}_1^* M_+ f_+(0) + \mathcal{B}_1^* G_-(1), \\ f_+(0) &= \mathcal{B}_0^* f_-(0) = \mathcal{B}_0^* M_+ f_+(1) + \mathcal{B}_0^* G_-(0), \end{aligned}$$

where \mathcal{B}_1^* is the boundary operator defined on the plane $x = 1$ and \mathcal{B}_0^* is the one defined on $x = 0$. Iterating, we get

$$\begin{aligned} (\mathbf{I} - \mathcal{B}_1^* M_+ \mathcal{B}_0^* M_+) f_+(1) &= \mathcal{B}_1^* M_+ \mathcal{B}_0^* G_-(0) + \mathcal{B}_1^* G_-(1), \\ (\mathbf{I} - \mathcal{B}_0^* M_+ \mathcal{B}_1^* M_+) f_+(0) &= \mathcal{B}_0^* M_+ \mathcal{B}_1^* G_-(1) + \mathcal{B}_0^* G_-(0), \end{aligned}$$

where \mathbf{I} is the identity operator. Now, since M_+ is of norm smaller than 1, so are $\mathcal{B}_1^* M_+ \mathcal{B}_0^* M_+$ and $\mathcal{B}_0^* M_+ \mathcal{B}_1^* M_+$ (since \mathcal{B} is of norm 1). Therefore, the operators $(\mathbf{I} - \mathcal{B}_1^* M_+ \mathcal{B}_0^* M_+)$ and $(\mathbf{I} - \mathcal{B}_0^* M_+ \mathcal{B}_1^* M_+)$ are invertible, and provide a unique expression of $f_+(1)$ and $f_+(0)$ in terms of g . Then, with (4.5.24), we find a uniquely defined expression of the solution of problem (4.5.20) which is easily proved to belong to $L^2([0, 1] \times \mathbb{S}^2)$. This ends the proof of proposition 5.2. \blacksquare

For $g \in L^2(\mathcal{S})$ satisfying $\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} g(x, \omega) d\omega dx = 0$, we denote by $T_v^{-1}(g)$ the unique function $f \in \mathcal{D}(T)$ given by proposition 5.1. Then the previous proof can be adapted in order to provide the following estimate (see [27] for further details):

Lemma 5.8 *For all $\delta > 0$, there exists a constant C_δ such that:*

$$\forall |v| \geq \delta, \quad \forall g \in \text{Im}(T_v), \quad |T_v^{-1}(g)|_{L^2(\mathcal{S})} \leq C_\delta |g|_{L^2(\mathcal{S})}. \quad (4.5.29)$$

We point out that the restriction that $|v|$ should be far enough from zero is needed by the coercivity condition (4.5.14). In the remainder of the paper, we only need g to be equal to ω_y and ω_z . We obviously have (since these functions are odd with respect to $\omega \in \mathbb{S}^2$):

Lemma 5.9 *The functions $g = \omega_y$ and $g = \omega_z$ satisfy the assumptions of propositions 5.1 and 5.2.*

Thus there exist functions $D_y(x, \omega; \underline{\xi}, \varepsilon)$, $D_z(x, \omega; \underline{\xi}, \varepsilon)$, solutions of problem (4.5.5) with right-hand sides $g = \omega_y$ and $g = \omega_z$ respectively, unique up to additive functions of $\underline{\xi}$ and ε . In addition, we need the following regularity for D_y , D_z :

Hypothesis 5.2 (i) D_y , D_z are bounded functions with bounded derivatives with respect to \underline{v} , $\underline{\xi}$ on $\Theta \setminus \{v = 0\}$.

(ii) The functions $\omega_i D_j(x, \omega; \underline{\xi}, \varepsilon)$ belongs to $L^1(\mathcal{S})$ and

$$\int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \omega_i D_j dx d\omega$$

is a C^1 function of $(\underline{\xi}, \varepsilon) \in \mathbb{R}_{\underline{\xi}}^2 \times \mathbb{R}_\varepsilon^+$.

Remark 5.1 Hypothesis 5.2 can be viewed as a regularity assumption on the data: the magnetic field B , the boundary scattering kernel K and the accommodation coefficient β . We do not look for explicit condition on these data because the developments would be technical and of rather limited interest. \blacksquare

5.3 Obtention of the SHE model

The rest of the proof of theorem 2.1 follows the same route as [17]. We just summarize the main steps. Given D_y (respectively D_z) the solutions of problem (4.5.5) with $g = \omega_y$ (respectively $g = \omega_z$), we define the diffusivity tensor as follows:

$$\mathbb{D}_{ij} = (2\varepsilon)^{3/2} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \omega_j D_i(x, \omega; \underline{\xi}, \varepsilon) dx d\omega, \quad i, j \in \{y, z\}.$$

We remark that \mathbb{D} is a C^1 function of $(\underline{\xi}, \varepsilon) \in \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+$. We also note that the definition of \mathbb{D}_{ij} does not depend on the arbitrary additive function of $\underline{\xi}$ and ε which enters in the definition of D_j . Let us introduce the current $\underline{J}^\alpha(\underline{\xi}, \varepsilon, t) = (J_y^\alpha, J_z^\alpha)$ as follows:

$$\underline{J}^\alpha(\underline{\xi}, \varepsilon, t) = \frac{|v|}{\alpha} \int_0^1 \int_{\mathbb{S}^2} \underline{v} f^\alpha(x, \underline{\xi}, |v|, \omega, t) dx d\omega \quad (4.5.30)$$

Now, denoting by Θ' the position-energy space $\Theta' = \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+$ and by $d\theta'$ its volume element $d\theta' = d\xi d\varepsilon$ (note that $dv = |v|^2 d|v| d\omega = \sqrt{2\varepsilon} d\varepsilon d\omega$), we have:

Lemma 5.10 *As α goes to 0, the current $\underline{J}^\alpha(\underline{\xi}, \varepsilon, t)$ converges in the distributional sense towards $\underline{J}^0(\underline{\xi}, \varepsilon, t)$. More precisely, for every $\psi \in C^1(\Theta' \times [0, T], \mathbb{R}^2)$ with compact support in $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}_*^+ \times [0, T]$, we have:*

$$\begin{aligned} \lim_{\alpha \rightarrow 0} \int_0^T \int_{\Theta'} \underline{J}^\alpha \cdot \underline{\psi} d\theta' dt &= \int_0^T \int_{\Theta'} \underline{J}^0 \cdot \underline{\psi} dt d\theta' \\ &= \int_0^T \int_{\Theta'} F \left(\nabla_{\underline{\xi}} - \underline{E} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) \cdot (\mathbb{D}^T \underline{\psi}) dt d\theta', \end{aligned} \quad (4.5.31)$$

and thus

$$\underline{J}^0 = -\mathbb{D} \cdot \left(\nabla_{\underline{\xi}} - \underline{E} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) F^0. \quad (4.5.32)$$

We note that the right-hand side of equation (4.5.31) is the weak form of that of eqn. (4.2.6).

Proof: We recall that the proof consists in using the weak formulation (4.5.1) with $\phi = \sqrt{2\varepsilon} \underline{\psi}(\underline{\xi}, \varepsilon, t) \cdot \underline{D}(x, \omega; \underline{\xi}, \varepsilon)$ as a test function (hypothesis 5.2 provides all the necessary assumptions to allow this computation). The terms of the order α^{-1} in the weak formulation (4.5.1) exactly give the integral at the left-hand side of (4.5.31). By passing to the limit as $\alpha \rightarrow 0$, and after some computations, the order 1 terms of (4.5.1) lead to

the expression at the right-hand side of (4.5.31). The computations are detailed in [17]. ■

To end the proof of Theorem 2.1, there remains to prove that equation (4.2.5) holds in a weak sense. The result is just stated below. The proof relies on the use of the weak formulation (4.5.1) with $\phi = \underline{\psi}(\xi, \varepsilon, t)$ as a test function and is detailed in [17].

Lemma 5.11 *For any test function ψ belonging to $C^2(\Theta' \times [0, T])$, with compact support in $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}^+ \times [0, T]$, we have:*

$$\int_0^T \int_{\Theta'} \left(4\pi\sqrt{2\varepsilon} F^0 \frac{\partial \psi}{\partial t} + \underline{J}^0 \cdot \left(\nabla_{\xi} - \underline{E} \frac{\partial}{\partial \varepsilon} \right) \psi \right) dt d\theta' + \int_{\Theta'} 4\pi\sqrt{2\varepsilon} F_I \psi|_{t=0} d\theta' = 0. \quad (4.5.33)$$

5.4 Properties of the diffusivity

In this section, we underline that the diffusion tensor \mathbb{D} is positive definite. Moreover, under a certain invariant property of the collision operator \mathcal{L} (always satisfied in practice), it satisfies the Onsager reciprocity relation saying that the transpose of $\mathbb{D}(B)$ for a given magnetic field B equals the diffusion tensor associated with $-B$.

Proposition 5.3 *The diffusion tensor \mathbb{D} is positive definite: there exists $C > 0$ such that:*

$$(\mathbb{D}Y, Y) = \sum_{i,j=1}^2 \mathbb{D}_{ij} Y_i Y_j \geq C|Y|^2 = C \sum_{i=1}^2 Y_i^2. \quad (4.5.34)$$

Proof: The proof is a minor modification of the proof of [17] and is left to the reader. ■

Proposition 5.4 *Suppose that the collision operator \mathcal{L} satisfies the following invariance property :*

$$\mathcal{L}(f(-\omega)) = (\mathcal{L}f)(-\omega),$$

then the diffusion tensor \mathbb{D} satisfies the Onsager relation:

$$\mathbb{D}(B)^T = \mathbb{D}(-B).$$

Proof: Again, the proof follows that of [17]. ■

6 Explicit expression of the diffusivity for isotropic collisions operators

In this section, we are concerned with a subcase of hypothesis 5.1, the case where both the collision operator with atoms or ions \mathcal{L} and the boundary collision operator \mathcal{K} are isotropic. \mathcal{L} being isotropic means that it is given by (4.5.18) i.e.

$$\mathcal{L}f = \lambda([f] - f), \quad [f] = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} f(\omega) d\omega. \quad (4.6.1)$$

The boundary collision operator \mathcal{K} is isotropic if its kernel $K(\omega' \rightarrow \omega)$ does not depend on the outgoing angle ω . Given the constraints of the flux conservation and reciprocity (see hypothesis 3.1), we find that $K = \pi^{-1}$ and the boundary operator \mathcal{B} is written, using the coordinate system $(\sigma, \underline{\omega})$ on the sphere \mathbb{S}^2 (see section 5.2):

$$\begin{aligned} f(x = 0, \sigma = +1, \underline{\omega}) &= \beta_0 f(x = 0, \sigma = -1, \underline{\omega}) + \\ &\quad + (1 - \beta_0) \pi^{-1} \int_{|\underline{\omega}| \leq 1} f(x = 0, \sigma = -1, \underline{\omega}) d\underline{\omega} \end{aligned} \quad (4.6.2)$$

$$\begin{aligned} f(x = 1, \sigma = -1, \underline{\omega}) &= \beta_1 f(x = 1, \sigma = 1, \underline{\omega}) + \\ &\quad + (1 - \beta_1) \pi^{-1} \int_{|\underline{\omega}| \leq 1} f(x = 1, \sigma = 1, \underline{\omega}) d\underline{\omega}, \end{aligned} \quad (4.6.3)$$

where β_0 stands for $\beta(x = 0)$ and similarly for β_1 . We note that in the parametrization $(\sigma, \underline{\omega})$, the surface element is given by $d\omega = |\omega_x|^{-1} d\underline{\omega}$ so that the integrals at the right-hand sides of (4.6.2) and (4.6.3) are actually integrals $\int_{S_+(x)} f_+(x, \omega) |\omega_x| d\omega$.

We concentrate on the explicit computation of the solutions D_j , $j \in \{y, z\}$ of the auxiliary equation (4.5.5) with right-hand side $g = \omega_j$. By using the same invariance arguments under the action of the operator \mathcal{I} as in section 5.2, it is readily seen that the unique solution of (4.5.5) satisfying the additional condition (4.5.8) is actually a solution $D_j(x, \sigma, \omega_y, \omega_z)$ of the problem

$$-|v|\omega_x \frac{\partial D_j}{\partial x} + B \left(\omega_z \frac{\partial D_j}{\partial \omega_y} - \omega_y \frac{\partial D_j}{\partial \omega_z} \right) + \lambda D_j = \omega_j, \quad (4.6.4)$$

$$D_j(x = 0, \sigma = -1, \underline{\omega}) = \beta_0 D_j(x = 0, \sigma = 1, \underline{\omega}), \quad (4.6.5)$$

$$D_j(x = 1, \sigma = 1, \underline{\omega}) = \beta_1 D_j(x = 1, \sigma = -1, \underline{\omega}). \quad (4.6.6)$$

We recall that we denote by $\sigma = \omega_x/|\omega_x| \in \{-1, 1\}$ and consider the parametrization $(\sigma, \omega_y, \omega_z)$ of the sphere \mathbb{S}^2 , for which the surface element is $d\omega = |\omega_x|^{-1} d\omega_y d\omega_z$. We shall also be concerned with finding an explicit formula for the diffusivity tensor \mathbb{D} (4.2.8).

We use the notations:

$$b = \frac{B}{|v| |\omega_x|}, \quad \gamma = \frac{\lambda}{|v| |\omega_x|},$$

where we note a slight change compared with the definitions used in section 5.2. We shall rather consider $\tilde{D}_j(x') = 2D_j((x' + 1)/2)$, which is defined for $x' \in [-1, 1]$ and solves the problem (dropping the prime):

$$-|v|\omega_x \frac{\partial \tilde{D}_j}{\partial x} + \frac{B}{2} \left(\omega_z \frac{\partial \tilde{D}_j}{\partial \omega_y} - \omega_y \frac{\partial \tilde{D}_j}{\partial \omega_z} \right) + \frac{\lambda}{2} \tilde{D}_j = \omega_j, \quad (4.6.7)$$

$$\tilde{D}_j(x = -1, \sigma = -1, \underline{\omega}) = \beta_{-1} \tilde{D}_j(x = -1, \sigma = 1, \underline{\omega}), \quad (4.6.8)$$

$$\tilde{D}_j(x = 1, \sigma = 1, \underline{\omega}) = \beta_1 \tilde{D}_j(x = 1, \sigma = -1, \underline{\omega}), \quad (4.6.9)$$

(where we use β_{-1} instead of β_0), and the diffusivity is given by

$$\mathbb{D} = (2\varepsilon)^{3/2} \frac{1}{4} \int_{-1}^1 \int_{\mathbb{S}^2} \tilde{D}(x, \omega) \omega dx d\omega. \quad (4.6.10)$$

We shall drop the tildes in the remainder of this section. We introduce the change of variables

$$\omega_y^\dagger = \omega_y \cos(\sigma bx/2) + \omega_z \sin(\sigma bx/2), \quad \omega_z^\dagger = -\omega_y \sin(\sigma bx/2) + \omega_z \cos(\sigma bx/2), \quad (4.6.11)$$

and $D_j^\dagger(x, \sigma, \omega_y^\dagger, \omega_z^\dagger) = D_j(x, \sigma, \omega_y, \omega_z)$, . We introduce the following complex numbers (with i such that $i^2 = -1$):

$$\Lambda = \lambda - iB, \quad \Gamma = \frac{\Lambda}{|v| |\omega_x|} = \gamma - ib, \quad \Omega^\dagger = \omega_y^\dagger + i\omega_z^\dagger, \quad D^\dagger = D_y^\dagger + iD_z^\dagger.$$

Then, $D^\dagger(x, \sigma, \Omega^\dagger)$ is a solution of

$$\frac{\partial D^\dagger}{\partial x} - \frac{\sigma\gamma}{2} D^\dagger = -\frac{1}{\sigma |v| |\omega_x|} \Omega^\dagger e^{i\sigma bx/2}, \quad (4.6.12)$$

together with the boundary conditions (4.6.8) and (4.6.9). For D^\dagger , we prove:

Lemma 6.1 *We have*

$$D^\dagger(x, \sigma, \Omega^\dagger) = \frac{\Omega^\dagger}{\Lambda/2} e^{\sigma\gamma x/2} [2A \sinh(\Gamma/2) (e^{-\gamma} \beta_\sigma + 1) + e^{-\sigma\Gamma x/2} - e^{\Gamma/2}], \quad (4.6.13)$$

with $A = (1 - \beta_1 \beta_{-1} e^{-2\gamma})^{-1}$.

Proof: By integrating (4.6.12), we find

$$D^\dagger(x, \sigma, \Omega^\dagger) = e^{\sigma\gamma(x+1)/2} D^\dagger(-1, \sigma, \Omega^\dagger) + \psi_{-1}(x, \sigma, \Omega^\dagger), \quad (4.6.14)$$

$$= e^{\sigma\gamma(x-1)/2} D^\dagger(1, \sigma, \Omega^\dagger) + \psi_1(x, \sigma, \Omega^\dagger), \quad (4.6.15)$$

with

$$\psi_{\mp 1}(x, \sigma, \Omega^\dagger) = \frac{\Omega^\dagger}{\Lambda/2} e^{\sigma\gamma x/2} (e^{-\sigma\Gamma x/2} - e^{\pm\sigma\Gamma/2}). \quad (4.6.16)$$

Then, iterating formulae (4.6.14), (4.6.15) with the boundary conditions (4.6.8), (4.6.9), we obtain:

$$D^\dagger(x = -\sigma, \sigma, \Omega^\dagger) = A [e^{-\gamma} \beta_\sigma \psi_{-\sigma}(x = \sigma, -\sigma, \Omega^\dagger) + \psi_\sigma(x = -\sigma, \sigma, \Omega^\dagger)]. \quad (4.6.17)$$

Inserting the boundary values (4.6.17) into (4.6.15) and using (4.6.16) for $\psi_{\pm 1}$, we find (4.6.13). \blacksquare

Then, we prove

Proposition 6.1 *The diffusion matrix \mathbb{D} is given by:*

$$\mathbb{D} = (2\varepsilon)^{3/2} \begin{pmatrix} d_r & -d_i \\ d_i & d_r \end{pmatrix}, \quad (4.6.18)$$

where the complex number $d = d_r + id_i$ has the expression:

$$d = \frac{1}{\Lambda} \int_0^1 \left[1 - \frac{\sinh(\Gamma/2)e^{\Gamma/2}}{\Gamma/2} + A \frac{\sinh^2(\Gamma/2)}{\Gamma/2} (e^{-\gamma}(\beta_{-1} + \beta_1) + 2) \right] (1 - w^2) 2\pi dw , \quad (4.6.19)$$

with

$$\Gamma = \Gamma(w) = \frac{\Lambda}{\sqrt{2\varepsilon} w} , \quad \gamma = \gamma(w) = \frac{\lambda}{\sqrt{2\varepsilon} w} , \quad A = A(w) = \frac{1}{1 - \beta_1 \beta_{-1} e^{-2\gamma(w)}} ,$$

and $\Lambda = \lambda - iB$.

We remark that the formula is considerably more complex than in the case of no collisions with the atoms or ions ($\lambda = 0$, see [13]). The collisions with the boundary and inside the gap combine in a fairly complex way. The coefficients d_r and d_i can be compared with the so-called Pedersen and Hall conductivities of collisional magnetized plasmas (see e.g. [30]). However, there is no such simple formula for the diffusivities in the present case like that of the Pedersen and Hall conductivities.

We note that the value of d can be computed by numerical integrations: it can be expressed as a combination of elementary integrals which are functions of the three parameters $\lambda/\sqrt{2\varepsilon}$, $B/\sqrt{2\varepsilon}$ and $\beta_1 \beta_{-1}$. This expression is used in [16] for numerical computations of the electron fluid in a real plasma propellor for satellites.

Proof: By an argument involving rotational invariance, it is easy to show that the diffusion matrix \mathbb{D} has the form (4.6.18) and that

$$\begin{aligned} d_r &= \frac{1}{4} \int_{-1}^1 \sum_{\sigma=\pm 1} \int_{|\Omega|<1} D_y \omega_y |\omega_x|^{-1} d\Omega dx \\ &= \frac{1}{4} \int_{-1}^1 \sum_{\sigma=\pm 1} \int_{|\Omega|<1} D_z \omega_z |\omega_x|^{-1} d\Omega dx \\ &= \frac{1}{8} \int_{-1}^1 \sum_{\sigma=\pm 1} \int_{|\Omega|<1} (D_y \omega_y + D_z \omega_z) |\omega_x|^{-1} d\Omega dx , \end{aligned}$$

and similarly

$$d_i = \frac{1}{8} \int_{-1}^1 \sum_{\sigma=\pm 1} \int_{|\Omega|<1} (D_z \omega_y - D_y \omega_z) |\omega_x|^{-1} d\Omega dx .$$

Therefore

$$d = d_r + id_i = \frac{1}{8} \int_{-1}^1 \sum_{\sigma=\pm 1} \int_{|\Omega|<1} D(\Omega) \Omega^* |\omega_x|^{-1} d\Omega dx ,$$

where Ω^* denotes the complex conjugate of Ω , and, by the change of variables (4.6.11):

$$d = d_r + id_i = \frac{1}{8} \int_{-1}^1 \sum_{\sigma=\pm 1} \int_{|\Omega^\dagger|<1} D^\dagger(\Omega^\dagger) (\Omega^\dagger e^{i\sigma bx/2})^* |\omega_x|^{-1} d\Omega^\dagger dx .$$

Now, inserting the expression (4.6.13) of D^\dagger , and performing the integration with respect to x , we obtain:

$$d = \frac{1}{\Lambda} \int_{|\Omega^\dagger| < 1} \left[1 - \frac{\sinh(\Gamma/2)e^{\Gamma/2}}{\Gamma/2} + A \frac{\sinh^2(\Gamma/2)}{\Gamma/2} (e^{-\gamma}(\beta_{-1} + \beta_1) + 2) \right] \times \times |\Omega^\dagger|^2 |\omega_x|^{-1} d\Omega^\dagger.$$

Then, the expression (4.6.19) is obtained by using the change to polar coordinates in Ω^\dagger : $|\Omega^\dagger|^2 = 1 - w^2$, $d\Omega^\dagger = 2\pi w dw$, $|\omega_x| = w$. \blacksquare

7 Conclusion

In this paper, we have studied the macroscopic behaviour of an electron fluid confined between two plane parallel solid plates and subject to crossed electric and magnetic fields (the magnetic field being normal to the plates). The electrons undergo collisions both with the solid plates and with the atoms or ions of a gas filling the gap between the plates. We showed that, under physically realistic assumptions on the nature of the collisions, the macroscopic behaviour of the gas is described by a 'Spherical Harmonics Expansion' (SHE) type model. A rigorous derivation of the model from the microscopic kinetic description has been given. An explicit computation of the diffusivity in the case of isotropic collisions, which is a very useful practical case, is also derived.

References

- [1] H. Babovsky, *On the Knudsen flows within thin tubes*, J. Statist. Phys., **44** (1986), pp. 865–878.
- [2] H. Babovsky, C. Bardos and T. Platkowski, *Diffusion approximation for a Knudsen gas in a thin domain with accommodation on the boundary*, Asymptotic Analysis, **3** (1991), pp. 265–289.
- [3] C. Bardos, *Problèmes aux limites pour les équations aux dérivées partielles du premier ordre à coefficients réels; Théorèmes d'approximation; application à l'équation de transport*, Ann. Scient. Ec. Norm. Sup., **4** (1970), pp. 185–233.
- [4] C. Bardos, R. Santos and R. Sentis, *Diffusion approximation and computation of the critical size*, Trans. A. M. S., **284** (1984), pp. 617–649.
- [5] N. Ben Abdallah, P. Degond, *On a hierarchy of macroscopic models for semiconductors*, J. Maths. Phys. **37** (1996), pp. 3306–3333.
- [6] N. Ben Abdallah, P. Degond, A. Mellet, F. Poupaud, *Electron transport in semiconductor superlattices*, preprint, 1999.

- [7] A. Bensoussan, J. L. Lions and G. C. Papanicolaou, *Boundary layers and homogenization of transport processes*, J. Publ. RIMS Kyoto Univ. **15** (1979), pp. 53–157.
- [8] C. Börgers, C. Greengard et E. Thomann, *The diffusion limit of free molecular flow in thin plane channels*, SIAM J. Appl. Math., Vol. 52, No. 4, (1992), 1057–1075.
- [9] H. Brézis, Analyse Fonctionnelle, théorie et applications, Masson, Paris, 1983.
- [10] G. R. Brewer, Ion propulsion technology and Applications, Gordon & Breach, 1970.
- [11] C. Cercignani, The Boltzmann equation and its applications, Springer, New-York, 1988.
- [12] P. Degond, *Mathematical modelling of microelectronics semiconductor devices*, in AMS/IP Studies in Advanced Mathematics, vol 15, AMS and International Press, 2000, pp. 77-110.
- [13] P. Degond, *A model of near-wall conductivity and its application to plasma thrusters*, SIAM J. Appl. Math., **58** (1998), pp.1138–1162.
- [14] P. Degond, *Un modèle de conductivité pariétale: application au moteur à propulsion ionique*, C. R. Acad. Sci. Paris, **322** (1996), pp. 797–802.
- [15] P. Degond, V. Latocha, L. Garrigues, J. P. Boeuf, *Electron transport in stationary plasma thrusters*, Transp. Th. Stat. Phys. **27** (1998), pp. 203–221.
- [16] P. Degond, V. Latocha, L. Garrigues, J. P. Boeuf, in preparation.
- [17] P. Degond and S. Mancini, *Diffusion driven by collisions with the boundary*, preprint, 1999.
- [18] J. L. Delcroix and A. Bers, Physique des plasmas, vol 1 and 2, inter'editions / CNRS 'editions, Paris, 1994.
- [19] L. Dogbe, PhD Dissertation, University Paris 7, 1999.
- [20] L. Garrigues, PhD thesis, Université Paul Sabatier, Toulouse, France, 1998, unpublished.
- [21] F. Golse, *Anomalous diffusion limit for the Knudsen gas*, Asymptotic Analysis, (1998).
- [22] F. Golse and F. Poupaud, *Limite fluide des équations de Boltzmann des semiconducteurs pour une statistique de Fermi-Dirac*, Asymptotic Analysis **6** (1992), pp. 135–160.
- [23] V. Girault, P.A. Raviart, *Finite element methods for the Navier-Stokes equations*, Springer Verlag, Berlin 1986.

- [24] T. Goudon and F. Poupaud, *Approximation by homogenization and diffusion of kinetic equations*, preprint.
- [25] V. Latocha, PhD thesis, Université Paul Sabatier, Toulouse, France, in preparation.
- [26] S. Mancini, *Mathematical models for charged particle diffusion and transport*, PhD dissertation, Dipartimento U. Dini, Università di Firenze, Italia (2000).
- [27] A. Mellet, *Macroscopic model for coupled surface and bulk collisions in semiconductor superlattices*, in preparation.
- [28] A.I. Morozov et A. P. Shubin, *Electron kinetics in the wall-conductivity regime I and II*, Sov. J. Plasma Phys. **10** (1984) pp. 728–735
- [29] A.I. Morozov et A. P. Shubin, *Analytic methods in the theory of near-wall conductivity I and II*, Sov. J. Plasma Phys., **16** (1990), pp. 711–715.
- [30] G. K. Parks, Physics of space plasmas, an introduction, Addison-Wesley, Redwood city, Ca, 1991.
- [31] A. Pazy, Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations, Springer, New York, (1983).
- [32] F. Poupaud, *Étude de l'opérateur de transport $Au = a\nabla u$* , manuscript, unpublished.
- [33] Yu. P. Raizer, Gas discharge Physics, Springer, Berlin, 1997.

Chapitre 5

Résolution d'un problème elliptique

La simulation d'un propulseur SPT requiert la connaissance du potentiel électrique. Il conditionne d'une part le courant des électrons, et donc l'ionisation. D'autre part, la forme de ses équipotentielles influence le trajet des ions. Dans les moteurs existants, le jet des ions est un cône d'une dizaine de degrés, et les recherches actuelles tendent à faire diminuer la taille du cône afin de maximiser l'impulsion obtenue par réaction.

Or si nous nous intéressons au cas stationnaire, ce potentiel est solution de l'équation $\nabla \cdot j = S$ d'après la conservation de la charge, où j désigne le courant d'électrons et S rend compte du courant de charges positives. Du fait de la présence d'un champ magnétique assez fort pour influencer les électrons, les mobilités des électrons le long du champ d'une part, et perpendiculairement à celui-ci d'autre part, sont différentes. Aussi le courant est-il donné par $j = -\sigma \nabla W$, où σ est une matrice modélisant une mobilité anisotrope, ce qui distingue notre problème de l'équation de Poisson.

Dans ce chapitre nous définissons le problème de diffusion anisotrope que nous avons traité, puis nous explicitons les choix que nous avons faits pour la discréétisation et pour la résolution du problème discréétisé. Nous montrons ensuite quelques tests numériques, qui motivent la mise au point d'une méthode de paramétrisation. Dans un deuxième temps, nous décrivons la méthode de paramétrisation que nous avons mise au point, et son implémentation. Nous terminons par la présentation de résultats numériques.

5.1 Problème elliptique fortement anisotrope

Dans cette section nous définissons le problème que nous avons cherché à résoudre, et nous mettons en relief les difficultés posées par les ordres de grandeur en présence dans un SPT.

5.1.1 Définition du problème

Considérons le domaine bi-dimensionnel

$$\Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2, 0 \leq x \leq L, 0 < R_0 \leq y \leq R_1\}$$

Dans ce domaine est établi un champ magnétique $B(x, y)$ et une densité d'électrons $n(x, y)$. Nous notons les segments formant la frontière de Ω :

$$\begin{aligned}\partial\Omega_0 &= \{(x, y) \in \Omega, y = R_0\} \\ \partial\Omega_1 &= \{(x, y) \in \Omega, y = R_1\} \\ \partial\Omega_a &= \{(x, y) \in \Omega, x = 0\} \\ \partial\Omega_c &= \{(x, y) \in \Omega, x = L\}.\end{aligned}$$

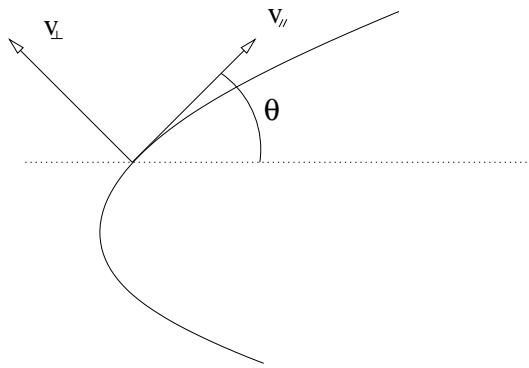


FIG. 5.1 – Base naturelle le long d'une ligne de champ magnétique

Notons $\theta(x, y)$ l'angle formé entre $B(x, y)$ et l'axe des x . Nous définissons les champs de vecteurs normés, qui forment la base naturelle associée aux lignes de champ magnétique (cf figure 5.1) :

$$\begin{aligned}v_{\parallel} &= (\cos(\theta), \sin(\theta))^t \\ v_{\perp} &= (-\sin(\theta), \cos(\theta))^t\end{aligned}$$

qui vérifient pour tout $(x, y) \in \Omega$: $v_{\parallel}(x, y) = \frac{B(x, y)}{\|B(x, y)\|}$ et $v_{\perp}(x, y) \perp B(x, y)$. Compte tenu du confinement du mouvement des électrons le long des lignes de champ magnétique, la mobilité des électrons est anisotrope. Nous notons $\sigma_{\parallel}(x, y) > 0$ la conductivité suivant $v_{\parallel}(x, y)$ et $\sigma_{\perp}(x, y) > 0$ la conductivité suivant $v_{\perp}(x, y)$. En définissant les matrices de passage :

$$(x, y) \mapsto P(\theta(x, y)) = (v_{\parallel}, v_{\perp}),$$

qui vérifient $(P(\theta))^t = (P(\theta))^{-1} = P(-\theta)$, les matrices de conductivité s'écrivent dans la base canonique (e_x, e_y) :

$$\sigma(x, y) = P(\theta(x, y)) \begin{bmatrix} \sigma_{\parallel}(x, y) & 0 \\ 0 & \sigma_{\perp}(x, y) \end{bmatrix} P(-\theta(x, y)). \quad (5.1)$$

Alors le courant d'électrons peut se déduire du potentiel électrochimique¹ $W(x, y) = V - U_T \ln n$ (où U_T est une tension dépendant de la température électronique, supposée constante, $n(x, y)$ est la densité de plasma, et $V(x, y)$ est le potentiel électrique) par la relation :

$$j(x, y) = -\sigma \nabla W(x, y). \quad (5.2)$$

Nous nous proposons de résoudre l'équation stationnaire suivante, d'inconnue W :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot j(x, y) &= S(x, y), \quad \forall (x, y) \in \Omega \\ \text{avec } j(x, y) &= -\sigma \nabla W(x, y) \end{aligned} \quad (5.3)$$

soumise aux conditions aux limites :

$$\begin{aligned} W(x, y) &= W_a(y), \quad \forall (x, y) \in \partial \Omega_a \\ W(x, y) &= W_c(y), \quad \forall (x, y) \in \partial \Omega_c \\ (j(x, y) \cdot e_y) &= 0, \quad \forall (x, y) \in \partial \Omega_0 \cup \partial \Omega_1, \end{aligned} \quad (5.4)$$

où $(a \cdot b)$ désigne le produit scalaire entre les vecteurs a et b .

5.1.2 Anisotropie

En pratique, on se donne les mobilités μ_{\perp} et μ_{\parallel} [8] :

$$\begin{aligned} \mu_{\parallel} &= \frac{q}{m\nu}, \\ \mu_{\perp} &= \mu_{\parallel} \frac{1}{1 + (\mu_{\parallel} B)^2} = \frac{q}{m\nu} \left(\frac{1}{1 + \frac{\omega^2}{\nu^2}} \right), \end{aligned}$$

en notant ν la fréquence de collision des électrons tenant compte des collisions en volume et aux parois, m et q la masse et la charge d'un électron, et $\omega = \frac{qB}{m}$ la pulsation cyclotron. Les conductivités sont alors définies par :

$$\begin{aligned} \sigma_{\parallel} &= qn\mu_{\parallel} \\ \sigma_{\perp} &= qn\mu_{\perp} \end{aligned}$$

Les définitions des mobilités nous montrent que les collisions ralentissent les électrons le long d'une ligne de champ magnétique, alors qu'elles favorisent la mobilité perpendiculairement au champ magnétique. Nous notons :

$$\gamma(x, y) = \frac{\mu_{\parallel}}{\mu_{\perp}} = \frac{\sigma_{\parallel}}{\sigma_{\perp}}$$

¹appelé aussi quasi niveau de Fermi en physique des semi-conducteurs.

le rapport d'anisotropie. Dans un SPT, $\omega \approx 10^8 \text{ s}^{-1}$ et $\nu \ll 10^7 \text{ s}^{-1}$ donc $\frac{1}{1+\frac{\omega^2}{\nu^2}} \approx \frac{\nu^2}{\omega^2}$. Alors, le rapport d'anisotropie est approximativement égal à :

$$\gamma(x, y) \approx \left(\frac{q}{m} \frac{B^2}{\nu} \right) = \frac{\omega^2}{\nu^2},$$

ce qui nous indique que l'anisotropie peut être forte ($1 \ll \gamma(x, y)$) si le champ magnétique est fort alors que la fréquence de collision est faible. Dans les conditions de fonctionnement d'un SPT, le rapport d'anisotropie atteint des valeurs supérieures à 10^6 , ce qui pose de sérieuses difficultés numériques, comme nous le montrerons dans la section 5.3. Notre objectif est de proposer une méthode de résolution du problème (5.3, 5.4) dans des conditions réalistes, c'est-à-dire lorsque l'anisotropie est très forte par endroits.

5.1.3 Directions propres variables

D'après la définition (5.1), les directions propres de la matrice de mobilité μ sont alignées avec le champ magnétique et la direction orthogonale au champ magnétique. Lorsque le champ magnétique est aligné avec e_x ou e_y , la matrice de mobilité est diagonale dans la base (e_x, e_y) , et les dérivées du courant $\frac{\partial}{\partial x} j(x, y)$ et $\frac{\partial}{\partial y} j(x, y)$ sont proportionnelles (respectivement) à $\frac{\partial}{\partial x} W(x, y)$ et $\frac{\partial}{\partial y} W(x, y)$. De ce fait, il n'y aura pas de dérivées croisées $\frac{\partial^2 W}{\partial x \partial y}$ dans l'équation (5.3) et si c'est le cas dans le domaine Ω tout entier, alors les techniques de discréétisation de problèmes uni-dimensionnels s'appliquent facilement [9].

Dans le cas plus général où les directions propres sont obliques, mais de direction constante, il est possible d'adapter le maillage du domaine de façon à construire des schémas précis [39]. Cette situation a été exploitée en modélisation de réservoirs pétroliers et a conduit à des codes industriels [1, 2].

Nous nous intéressons au cas plus général encore où les directions propres sont variables, en supposant toutefois que les variations sont régulières.

5.2 Méthode de volumes finis sur maillage cartésien

Dans cette section nous expliquons la démarche que nous avons suivie pour discréétiser et résoudre le problème (5.3, 5.4). Etant donné que ce problème est posé par une loi de conservation, nous nous sommes tournés vers des méthodes de volumes finis. La géométrie de Ω autorise l'utilisation d'un maillage cartésien, et nous nous limitons à ce cadre dès que le maillage intervient dans la méthode.

Dans un premier temps, nous expliquons les principes généraux d'une méthode de volumes finis, et son adaptation à la discréétisation de (5.3, 5.4). Puis nous développons un point central de la méthode, à savoir l'approximation des courants. Enfin, nous terminons par une brève discussion sur le choix d'un solveur pour le système linéaire obtenu.

5.2.1 Discrétisation par volumes finis

Dans ce paragraphe nous rappelons quelques principes qui mènent aux méthodes de volumes finis, qui sont des méthodes de discrétisation bien adaptées à la simulation numérique de différents types de lois de conservation (elliptiques, hyperboliques et paraboliques par exemple). Elles sont beaucoup utilisées dans plusieurs domaines d'ingénierie, comme la mécanique des fluides, le transfert de chaleur et de masse, ou la modélisation des milieux stratifiés [22]. La méthode adoptée pour discrétiser (5.3, 5.4) est exposée en parallèle avec la description des principes généraux.

Formule de Green

Là où les méthodes de différences finies s'appuient sur la discrétisation des dérivées de la fonction inconnue, les méthodes de volumes finis se fondent sur la conservation des courants. Soit l'équation stationnaire :

$$\operatorname{div}(j(W)(x, y)) = S(x, y) \quad \forall (x, y) \in \Omega \quad (5.5)$$

où $(x, y) \mapsto W(x, y) \in \mathbb{R}$ est une fonction inconnue, et $(x, y) \in \Omega \mapsto j(W)(x, y) \in \mathbb{R}^2$ un courant qui dépend de cette fonction. Alors pour des fonctions suffisamment régulières et $\omega \subset \Omega$, nous avons la formule de Green :

$$\int_{\omega} \operatorname{div}(j(x, y)) \, ds = \int_{\partial\omega} (j(x, y) \cdot n(x, y)) \, dl,$$

où ds représente l'élément d'aire de ω et dl l'élément de longueur de $\partial\omega$ orienté positivement, et $n(x, y)$ est la normale extérieure à $\partial\omega$. Soit $\Omega = \cup_{i \in I} \Omega_i$ une partition de Ω en *volumes de contrôle* Ω_i , définis par un maillage de Ω et qui sont des polygones convexes et bornés. Alors les méthodes de volumes finis consistent à utiliser, pour tous les volumes de contrôle :

$$\int_{\Omega_i} \operatorname{div}(j(x, y)) \, ds = \int_{\partial\Omega_i} (j(x, y) \cdot n(x, y)) \, dl,$$

de sorte que (5.5) devient, en l'intégrant sur chacun des volumes de contrôle, le système pour $i \in I$:

$$\left(\int_{\partial\Omega_i} (j(W)(x, y) \cdot n(x, y)) \, dl = \int_{\Omega_i} S(x, y) \, ds \right)_{i \in I} \quad (5.6)$$

Approximation des intégrales

Pour nous rapprocher encore du cadre que nous avons choisi pour notre étude, nous considérons un maillage cartésien (voir figure 5.2) où les valeurs de W sont données au centre des volumes de contrôle², et notées W_i . De plus, nous prenons $j(W) = -n\mu \nabla W$, où μ est défini en (5.1).

²Il existe au moins une autre classe de méthodes où les W_i sont portées par les coins des volumes de contrôle [32, 29].

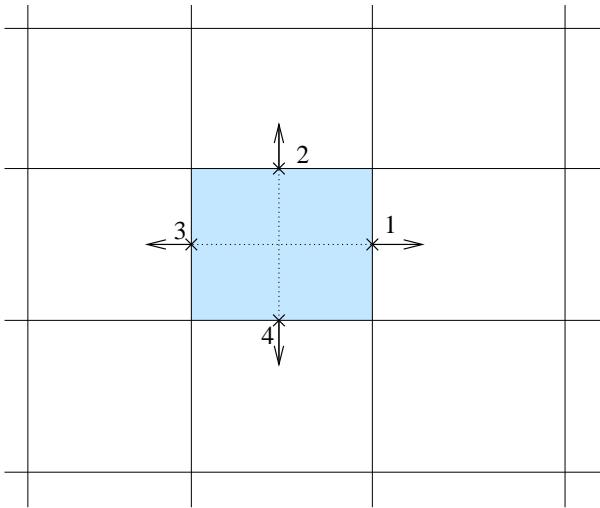


FIG. 5.2 – Volume de contrôle sur un maillage cartésien. Le vecteur normal est constant sur chacune des arêtes et aligné avec l'un des axes coordonnés.

Sur un maillage cartésien, les normales sont alignées avec l'un ou l'autre des axes coordonnées. Le produit scalaire avec une normale se ramène à sélectionner l'une des coordonnées de $j = (j_x, j_y)^t$ selon la direction de la normale. Prenons l'intégrale sur la première arête de $\partial\Omega_i$, que l'on note $\partial\Omega_i^1$:

$$I_i^1 = \int_{\partial\Omega_i^1} j_x(W)(x_1, y) dy, \quad (5.7)$$

où x_1 est l'abscisse des points de l'arête $\partial\Omega_i^1$. De façon standard [32], nous posons :

$$\int_{\partial\Omega_i^1} j_x(x_1, y) dl \approx l_1 \mathcal{J}_x(x_1, y_1)$$

où l_1 est la longueur et (x_1, y_1) le milieu de l'arête $\partial\Omega_i^1$, et $\mathcal{J}_x(x_1, y_1)$ est une approximation de $j_x(x_1, y_1)$. En procédant de la même façon sur les autres arêtes, l'équation bilan (5.6) devient :

$$\begin{aligned} l_1 \mathcal{J}_x(x_1, y_1) + l_2 \mathcal{J}_y(x_2, y_2) \\ -l_3 \mathcal{J}_x(x_3, y_3) - l_4 \mathcal{J}_y(x_4, y_4) = \int_{\Omega_i} S(x, y) ds \end{aligned} \quad (5.8)$$

Afin de former un système d'équations dont $(W_i)_{i \in I}$ sont les inconnues, nous proposons une relation entre les courants \mathcal{J} sur les arêtes et les inconnues W_i aux centres des mailles. C'est l'objet du paragraphe suivant.

5.2.2 Approximation des courants sur les arêtes en maillage cartésien

Dans ce paragraphe, nous précisons les formules adoptées pour approximer $j(x, y)$ à partir des W_i . Compte tenu de (5.7), nous devons donner $\mathcal{J}(x, y)$ au milieu des arêtes. Nous notons $(f)_i$ l'approximation d'une fonction f au milieu de l'arête i . Rappelons :

$$j = \sigma \nabla W = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \frac{\partial W}{\partial x} + \sigma_{xy} \frac{\partial W}{\partial y} \\ \sigma_{xy} \frac{\partial W}{\partial x} + \sigma_{yy} \frac{\partial W}{\partial y} \end{pmatrix}$$

En nous focalisant sur l'arête 1 (figure 5.3), nous donnons d'une part la relation entre les W_i et les dérivées $\frac{\partial W}{\partial x}$ (normale à l'arête) et $\frac{\partial W}{\partial y}$ (tangentielle à l'arête), d'autre part les valeurs des σ_{ij} en fonction des données aux noeuds du maillage. Par souci de simplicité, nous ne donnons les résultats que pour un maillage régulier dans les deux directions. On note h_x la largeur des volumes de contrôle, et h_y leur hauteur. Enfin, les voisins du centre d'une maille sont repérés par des indices définis par la figure 5.3.

Dérivée normale à une arête

La médiatrice de l'arête 1 rencontre les noeuds C et E (cf figure 5.3), ce qui suffit pour choisir la formule d'ordre 2 :

$$\left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)_1 = \frac{W_E - W_C}{h_x} + \mathcal{O}(h_x^2)$$

Cette formule est adaptée pour les autres arêtes :

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)_2 &= \frac{W_N - W_C}{h_y} + \mathcal{O}(h_y^2) \\ \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)_3 &= -\frac{W_O - W_C}{h_x} + \mathcal{O}(h_x^2) \\ \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)_4 &= -\frac{W_S - W_C}{h_y} + \mathcal{O}(h_y^2) \end{aligned}$$

Notons que lorsque la matrice de mobilité est diagonale, cette dérivée suffit pour calculer le courant normal à l'arête.

Dérivée tangentielle à une arête

La situation est différente quand il s'agit de calculer la dérivée tangentielle à l'arête. En effet, la tangente à l'arête passant par le milieu ne rencontre aucun noeud, et en particulier aucun des points du stencil. De ce fait, il faut *reconstruire* une fonction avec les données aux noeuds, à partir de laquelle on peut donner une approximation de la dérivée tangentielle. On trouvera dans [38] par exemple une discussion approfondie de cette question.

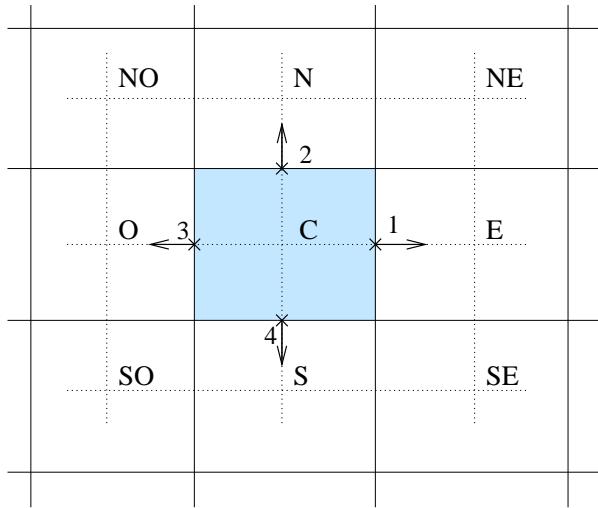


FIG. 5.3 – Notations des voisins du centre d'une maille. Nous considérons les schémas qui ne font intervenir que les neuf voisins représentés sur la figure (stencil à neuf points).

Notons (x_P, y_P) les coordonnées du point P . Alors, nous utilisons les formules d'ordre 2 :

$$\begin{aligned}\frac{\partial W}{\partial y}(x_C, y_C) &= \frac{W_N - W_S}{2h_y} + \mathcal{O}(h_y^2) \\ \frac{\partial W}{\partial y}(x_E, y_E) &= \frac{W_{NE} - W_{SE}}{2h_y} + \mathcal{O}(h_y^2)\end{aligned}$$

et l'approximation :

$$\left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial W}{\partial y}(x_C, y_C) + \frac{\partial W}{\partial y}(x_E, y_E) \right) + \mathcal{O}(h_x^2),$$

de sorte que nous utilisons :

$$\left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)_1 = \frac{W_N - W_S + W_{NE} - W_{SE}}{4h_y} + \mathcal{O}(h_x^2 + h_y^2),$$

et de la même façon :

$$\begin{aligned}\left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)_2 &= \frac{W_{NE} - W_{NO} + W_E - W_O}{4h_x} + \mathcal{O}(h_x^2 + h_y^2), \\ \left(\frac{\partial W}{\partial y} \right)_3 &= \frac{W_{NO} - W_{SO} + W_N - W_S}{4h_y} + \mathcal{O}(h_x^2 + h_y^2), \\ \left(\frac{\partial W}{\partial x} \right)_4 &= \frac{W_E - W_O + W_{SE} - W_{SO}}{4h_x} + \mathcal{O}(h_x^2 + h_y^2).\end{aligned}$$

Moyennes des matrices σ

Lorsque la matrice de mobilité est diagonale, le courant est donné par :

$$j = \sigma \nabla W = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} \frac{\partial W}{\partial x} \\ \sigma_{yy} \frac{\partial W}{\partial y} \end{pmatrix}.$$

Sur l'arête 1 par exemple, on est naturellement conduit au calcul de la *moyenne* de σ_{xx} entre les valeurs aux points C et E :

$$(\sigma_{xx})_1 = \langle (\sigma_{xx})_C, (\sigma_{xx})_E \rangle.$$

A ce stade, plusieurs moyennes sont possibles, par exemple :

- La moyenne arithmétique : $\langle a, b \rangle_a = \frac{1}{2} (a + b)$
- La moyenne harmonique : $\langle a, b \rangle_h = \left(\frac{1}{2} \left(\frac{1}{a} + \frac{1}{b} \right) \right)^{-1}$
- La moyenne géométrique : $\langle a, b \rangle_g = \exp \left(\frac{1}{2} (\ln a + \ln b) \right)$

La moyenne harmonique est couramment utilisée en modélisation des semi-conducteurs, où les systèmes étudiés sont composés de plusieurs régions aux propriétés physiques très différentes [37]. De fait, les coefficients d'un problème de diffusion posé dans ce cadre subissent des variations importantes sur de très faibles longueurs, et ils sont à la limite considérés comme discontinus. Ceci engendre dans certains cas une instabilité de la solution calculée, et l'utilisation de la moyenne harmonique dans la construction du schéma numérique permet de résoudre ce problème [9]. Pour le cas qui nous intéresse, Crumpton *et al.* ont apporté des arguments supplémentaires pour choisir la moyenne harmonique [12] lorsque la matrice de mobilité est diagonale, et c'est ce que nous avons fait dans un premier temps.

Toutefois, la situation est beaucoup moins claire lorsque la matrice de mobilité n'est pas diagonale. A l'inverse du cas uni-dimensionnel, il n'y a pas, à notre connaissance, d'argument qui permette de construire une moyenne (entre les matrices de mobilités) qui aurait des qualités particulières. Qui plus est, nous montrerons lors des tests la nécessité de maillages fins pour atteindre une précision suffisante, et les avantages d'une moyenne ou d'une autre ne sont plus sensibles. Nous avons donc choisi la moyenne arithmétique des matrices de mobilités aux points C et E, ce qui facilite la mise au point d'une méthode de paramétrisation comme ce sera expliqué dans la section (5.5).

5.2.3 Conditions aux limites

Terminons la présentation de la discréétisation de (5.3, 5.4) en examinant la prise en compte des conditions aux limites, de type Dirichlet et Neumann. Cette prise en compte est très facile dans le cas qui nous intéresse, pour peu que l'on définitisse le maillage de manière adéquate. Nous avons réparti les volumes de contrôle comme schématisé sur la figure 5.4. Avec cette répartition :

- La prise en compte de la condition de Neumann se fait en remplaçant $(j \cdot n)$ par la valeur imposée lors de l'intégration sur l'arête frontière (voir figure 5.4, volume de contrôle associé à W_j).

- En rappelant que nous utilisons un stencil à 9 points autour des centres (par exemple W_i (figure 5.4)) des volumes de contrôle, la prise en compte de la condition de Dirichlet se fait en remplaçant W_{d1} , W_{d2} et W_{d3} par la valeur prescrite. Ainsi, la condition de Dirichlet influencera le bilan autour de W_i .

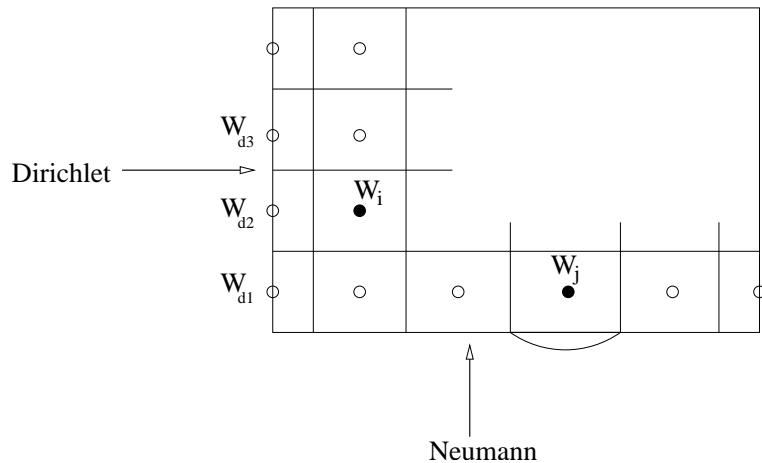


FIG. 5.4 – Prise en compte des conditions aux limites. Le courant prescrit à la frontière intervient lors du calcul de la circulation autour du volume de contrôle de centre u_j . Les valeurs données par la condition de Dirichlet sont incorporées dans le stencil autour de u_i .

5.2.4 Second membre donné par une divergence

Dans certains cas, le second membre S de (5.3) s'exprime comme la divergence d'un champ de vecteurs j_p (le courant de charges positives) connu :

$$S(x, y) = -\operatorname{div}(j_p(x, y)).$$

De plus, on suppose que ce courant vérifie les mêmes conditions de Neumann que j , c'est-à-dire :

$$(j_p(x, y) \cdot n(x, y)) = 0 \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_0 \cup \partial\Omega_1.$$

Dans ce cas, on utilise de nouveau la formule de Green sur chacun des volumes de contrôle :

$$\int_{\Omega_i} S(x, y) \, ds = \int_{\partial\Omega_i} (j_p(x, y) \cdot n(x, y)) \, dl,$$

de sorte qu'il est inutile de calculer la divergence de j_p .

Par ailleurs, lorsque $S(x, y) = -\operatorname{div}(j_p(x, y))$, l'équation (5.3) peut s'écrire :

$$\operatorname{div}(j + j_p) = 0 \tag{5.9}$$

et on définit le courant total :

$$j_{tot} = j + j_p.$$

En intégrant sur un contour bien choisi (cf figure 5.5), et en utilisant les conditions aux limites sur $(j \cdot n)$ et $(j_p \cdot n)$, (5.9) amène, $\forall 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq L$:

$$\left[\int_{R_0}^{R_1} j_{tot,x}(x, y) dy \right]_{x=x_1} = \left[\int_{R_0}^{R_1} j_{tot,x}(x, y) dy \right]_{x=x_2} \quad (5.10)$$

où $j_{tot,x}(x, y)$ désigne la première composante de $j_{tot}(x, y)$.

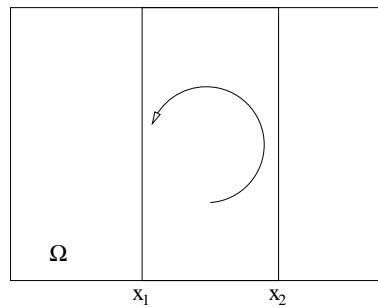


FIG. 5.5 – Contour d'intégration du courant total

En pratique, (5.10) est vérifiée numériquement avec une très bonne précision lorsque l'on calcule une approximation de $j = \sigma \nabla W$ à partir de la solution calculée W . Ceci est une propriété des méthodes de volumes finis, ce qui leur confère un avantage considérable sur d'autres méthodes.

5.2.5 Résolution du système linéaire

A l'aide des arguments développés dans les paragraphes précédents, nous avons été à même de construire un système linéaire, qui discrétise le problème (5.3, 5.4). La résolution de ce système par une méthode itérative s'est révélée délicate. Même assistés d'un préconditionnement LU-incomplet, les méthodes de type GMRES [35] et TFQMR[11] n'ont pas convergé. A notre connaissance, les méthodes multi-grilles sont les seules méthodes itératives ayant enregistré des succès dans ce domaine [12, 31, 41]. Malheureusement, la convergence n'est pas systématique et elle dépend notamment de l'angle que font les directions propres de σ avec les axes, et du rapport des mobilités.

Notre objectif étant de proposer un code de résolution suffisamment robuste pour être intégré à un modèle instationnaire, nous nous sommes finalement tournés vers une factorisation LU [11].

5.3 Test de la méthode

Dans cette section nous présentons un test de la discrétisation de ((5.3), (5.4)) pour différents rapports d'anisotropie. Dans un premier temps nous présentons le principe général du test, puis nous en donnons un exemple. Cet exemple mettra en relief les problèmes numériques liés à de forts rapports d'anisotropie.

5.3.1 Principe des tests

Afin de tester la résolution du problème :

$$\begin{aligned}\nabla \cdot j(x, y) &= S(x, y), \quad \forall (x, y) \in \Omega \\ \text{avec } j(x, y) &= -\sigma \nabla W(x, y)\end{aligned}$$

$$\begin{cases} W(x, y) &= W_a(y), \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_a \\ W(x, y) &= W_c(y), \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_c \\ (j(x, y) \cdot e_y) &= 0, \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_0 \cup \partial\Omega_1, \end{cases} \quad (5.11)$$

nous proposons de retrouver une fonction arbitraire satisfaisant les conditions aux limites. Afin de faciliter le calcul, nous choisissons un champ magnétique particulier donné par :

$$\begin{aligned}B_x(x, y) &= B_0 \beta \\ B_y(x, y) &= B_0 \sqrt{1 - \beta^2}\end{aligned}$$

en notant :

$$\begin{aligned}\omega &= \frac{\pi}{R_1 - R_0} \\ \psi &= \frac{\pi}{2} - \omega R_0 \\ \beta &= \sin(\omega y + \psi)\end{aligned}$$

et $B_0 > 0$ un réel arbitraire. Ce champ a les propriétés suivantes :

- Comme le montre la figure 5.6, sa courbure est importante, ce qui nous permet de nous écarter clairement du cas où les matrices de mobilités sont diagonales.
- Comme $B_y(x, y) = 0$ pour $(x, y) \in \partial\Omega_0 \cup \partial\Omega_1$, alors les matrices de mobilité sont diagonales pour tous les points de ce bord. Ainsi, la condition aux limites de Neumann $(j \cdot n) = 0$ devient :

$$\frac{\partial W}{\partial y}(x, y) = 0, \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_0 \cup \partial\Omega_1,$$

ce qui simplifie grandement la recherche d'une fonction arbitraire satisfaisant les conditions aux limites.

Remarque 5 *Le champ magnétique ne sert ici qu'à donner les directions propres de la matrice de mobilité. En particulier, il n'est pas nécessaire qu'il soit à divergence nulle.*

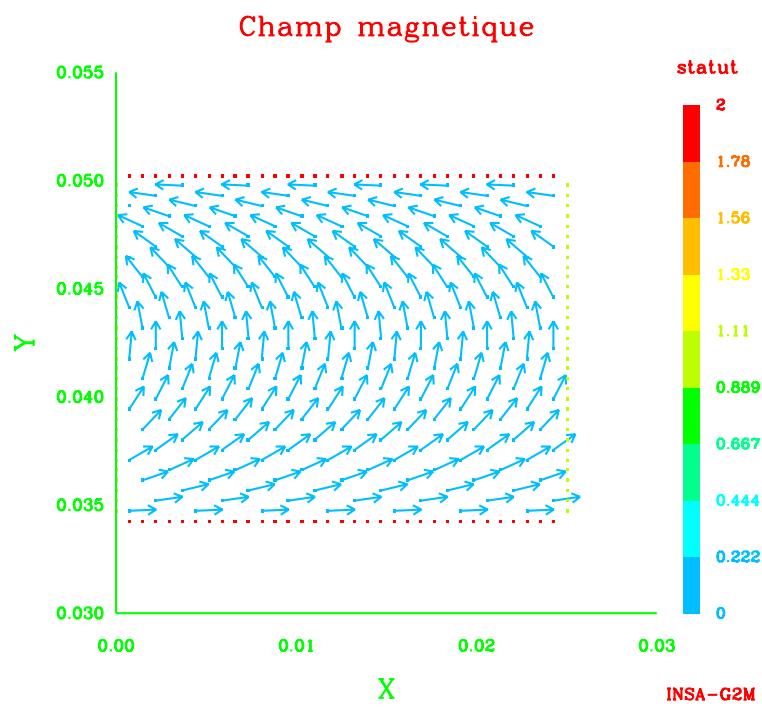


FIG. 5.6 – Champ magnétique choisi pour les tests. Sa norme est constante et il est aligné avec l’axe des x le long des bords où l’on impose une condition de Neumann. La variable en couleurs *statut* indique si un sommet fait partie du maillage, d’un bord Dirichlet ou d’un bord Neumann.

Nous définissons :

$$W_0(x, y) = \sin(\omega_1 x + \phi_1) \sin(\omega_2 y + \phi_2), \quad (5.12)$$

avec

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \frac{4\pi}{L} \\ \omega_2 &= \frac{4\pi}{R_1 - R_0} \\ \phi_1 &= \frac{\pi}{2} \\ \phi_2 &= \frac{\pi}{2} - \omega_2 R_0. \end{aligned}$$

Cette fonction vérifie les conditions aux limites :

$$\begin{aligned} W_0(x, y) &= \sin(\omega_2 y + \phi_2), \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_a \\ W_0(x, y) &= \sin(\omega_2 y + \phi_2), \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_c \\ \frac{\partial W_0}{\partial y}(x, y) &= 0, \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_0 \cup \partial\Omega_1, \end{aligned}$$

et son allure est donnée par la figure 5.7. En remarquant que ∇W_0 peut être calculé explicitement, le principe du test est de retrouver W_0 en résolvant le problème, :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot (-\sigma \nabla W(x, y)) &= \nabla \cdot (-\sigma \nabla W_0(x, y)), \quad \forall (x, y) \in \Omega \\ W(x, y) &= \sin(\omega_2 y + \phi_2), \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_a \\ W(x, y) &= \sin(\omega_2 y + \phi_2), \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_c \\ \frac{\partial W}{\partial y}(x, y) &= 0, \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_0 \cup \partial\Omega_1, \end{aligned}$$

5.3.2 Résultats numériques

Nous avons mené les tests pour une densité $n(x, y)$ constante, avec le champ magnétique décrit dans le paragraphe précédent, et pour des rapports de mobilités constants dans tout le domaine. Nous reportons les résultats pour des rapports de mobilités égaux à 1.3 (diffusion presque isotrope), 10, 10^3 et 10^6 . De plus, nous avons pris un domaine typique des SPT-100ML : $R_0 = 3.45 \text{ cm}$, $R_1 = 5 \text{ cm}$, $L = 2.5 \text{ cm}$, ce qui fixe le rapport d'aspect (entre la longueur et la hauteur) à environ 3/5. Pour ce domaine, nous avons utilisé un maillage régulier avec le même nombre de mailles dans les deux directions.

Nous avons dans un premier temps calculé la norme l^∞ de l'erreur entre la solution calculée et la solution théorique W_0 . La figure 5.8 représente la décroissance de cette erreur en fonction du nombre de mailles N_x . En rappelant que la solution théorique varie dans $[-1, 1]$, nous constatons que les résultats sont tout à fait acceptables lorsque la diffusion est isotrope. La situation se dégrade nettement lorsque le rapport d'anisotropie

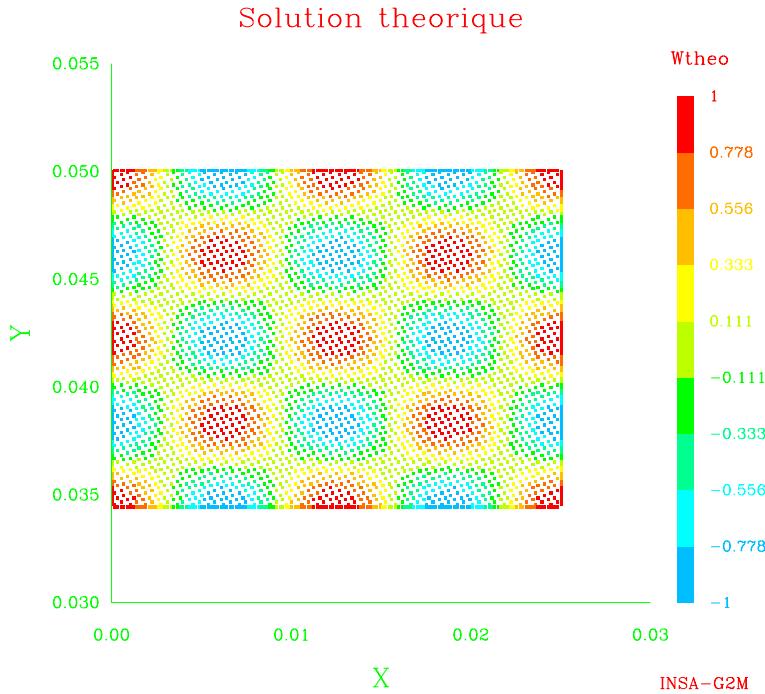


FIG. 5.7 – Solution théorique arbitraire

γ vaut 10 ; la décroissance de l'erreur est beaucoup plus lente et même pour un maillage relativement fin, elle dépasse quelques centièmes. Cette dégradation de la convergence se poursuit lorsque γ devient grand, et pour les cas que nous espérons atteindre, l'erreur est de l'ordre de grandeur de la solution théorique.

Si nous traçons à présent la différence entre la solution théorique et la solution calculée dans les cas $\gamma = 1.3$ (figure 5.9) et $\gamma = 10^3$ (figure 5.10) par exemple, nous constatons que la géométrie du champ magnétique se retrouve dans l'erreur avec $\gamma = 10^3$. Par contre, la géométrie du champ n'est pas dominante lorsque le rapport d'anisotropie est proche de 1. Ces observations semblent confirmer que la discrétisation et la résolution de notre problème ne reproduisent pas correctement la diffusion orthogonalement aux lignes de champ.

5.3.3 Conclusions du test

Nous avons observé que la méthode que nous avons proposé fonctionne correctement lorsque le rapport d'anisotropie est proche de 1, avec des lignes de champ magnétique fortement courbées. Par contre, lorsque le rapport d'anisotropie augmente, l'erreur entre la solution calculée et la solution théorique décroît de plus en plus lentement, et reste à des niveaux élevés. Pour atteindre des résultats satisfaisants, il faudrait multiplier le nombre de points du maillage, et donc construire des systèmes linéaires de grande taille, qui sont hors d'atteinte des solveurs directs. Suite à la discussion du paragraphe 5.2.5, nous ne souhaitons pas utiliser de solveurs itératifs pour notre problème, car les

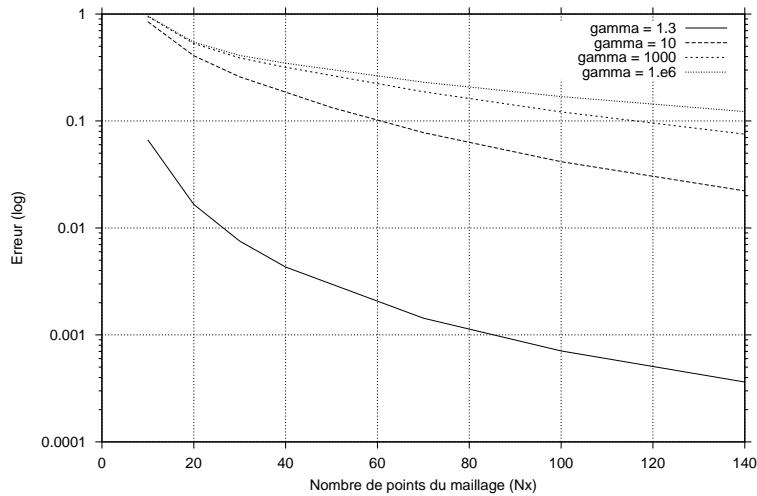


FIG. 5.8 – Décroissance de la norme l^∞ de l'erreur entre la solution théorique W_0 et la solution calculée. Les ordonnées sont en échelle logarithmique.

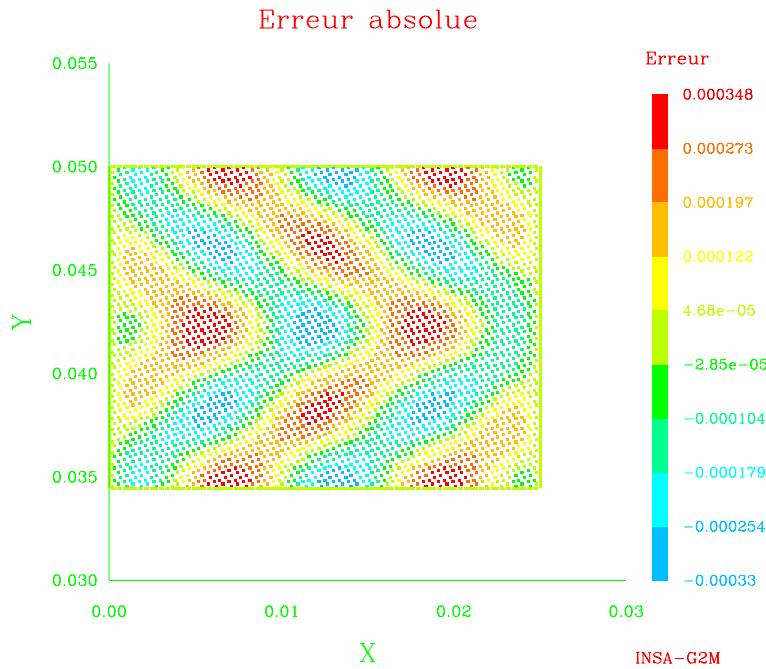


FIG. 5.9 – Erreur entre la solution théorique et la solution calculée pour $\gamma = 1.3$.

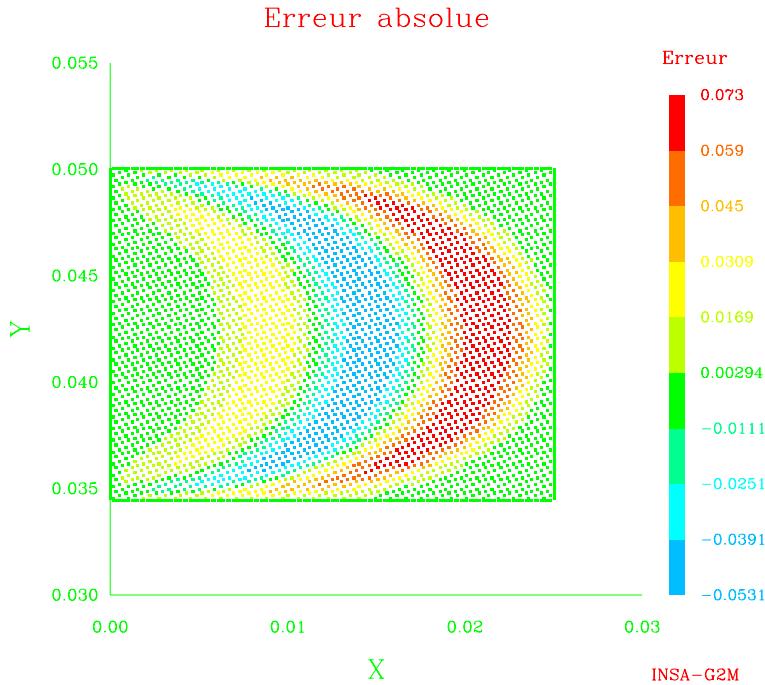


FIG. 5.10 – Erreur entre la solution théorique et la solution calculée pour $\gamma = 10^3$.

méthodes disponibles ne convergent pas toujours.

Aussi, nous sommes amenés à contourner les problèmes liés aux fortes anisotropies à l'aide d'une méthode de paramétrisation, qui est l'objet de la suite de ce chapitre.

5.4 Une technique de paramétrisation, motivation et applications

La nécessité de rechercher un optimum en un temps raisonnable a motivé le développement de techniques de paramétrisation [30, 28]. Pour résumer l'idée à la source de ces techniques prenons l'exemple du système linéaire suivant, qui dépend d'un paramètre réel α et que l'on écrit pour $\alpha = \alpha_0$:

$$A(\alpha_0) u(\alpha_0) = b(\alpha_0)$$

où $u(\alpha_0) \in \mathbb{R}^n$, $b(\alpha_0) \in \mathbb{R}^n$ et $A(\alpha_0) \in \mathcal{M}^n(\mathbb{R})$. Alors en dérivant ce système par rapport à α_0 , on obtient un nouveau système d'inconnue u' :

$$A(\alpha_0) u'(\alpha_0) = b'(\alpha_0) - A'(\alpha_0) u(\alpha_0)$$

et en dérivant p fois :

$$A(\alpha_0) u^{(p)}(\alpha_0) = b^{(p)}(\alpha_0) - \sum_{k=1}^p C_p^k A^{(k)} u^{(p-k)}(\alpha_0)$$

Si on est capable de calculer les $A^{(p)}(\alpha_0)$ et $b^{(p)}(\alpha_0)$, on peut résoudre les problèmes les uns après les autres (la résolution du problème d'inconnue $u^{(p)}$ permettant de calculer le second membre du système d'inconnue $u^{(p+1)}$). En pratique, si $A(\alpha)$ et $b(\alpha)$ peuvent s'exprimer à l'aide de fonctions usuelles, alors il est possible de connaître leurs dérivées par le calcul. Toutefois, il est courant d'avoir recours à un logiciel de différentiation automatique, qui analyse la programmation (en FORTRAN ou en C par exemple) de la fonction $\alpha \mapsto A(\alpha)$, et plus particulièrement les opérations où α intervient, additions, produits, etc... Le logiciel génère alors un programme calculant les dérivées de $\alpha \mapsto A(\alpha)$ [25].

On peut alors *extrapoler* la valeur de la solution $u(\alpha)$ grâce au polynôme de Taylor, sous réserves de convergence vers $u(\alpha)$:

$$u_p(\alpha) = \sum_{k=1}^p \frac{u^{(k)}(\alpha_0)}{k!} (\alpha - \alpha_0)^k$$

L'approche que nous venons de décrire a l'avantage majeur de ne nécessiter qu'une factorisation de matrice (celle de $A(\alpha_0)$), ce qui rend le calcul des dérivées successives de u peu coûteux. Par ailleurs, elle est applicable dans de nombreux cas intéressants, comme par exemple l'optimisation de la forme d'un guide d'ondes électromagnétiques [28]. Dans cette application, le polynôme de Taylor a permis de tracer la fonction coût sur un large intervalle de valeurs de α à partir de connaissances en un seul point de l'intervalle. Nous pouvons citer encore une application récente, qui a permis de calculer les déplacements dans un solide élastique lorsqu'il est quasi-incompressible ou incompressible [43] sans recourir à la formulation mixte.

Avec le problème de diffusion fortement anisotrope, nous avons adopté une démarche similaire à [43]. On peut montrer que dans certaines configurations de champ magnétique, la solution du problème limite $\gamma = \frac{\sigma_{\parallel}}{\sigma_{\perp}} \rightarrow +\infty$ est constante le long des lignes de champ, et qu'elle peut être déduite d'un problème uni-dimensionnel [5]. Il est donc inévitable d'avoir des difficultés numériques avec un maillage cartésien, puisque ce type de maillage tient compte de la géométrie du domaine mais pas de celle du champ magnétique. Par contre, le problème de diffusion isotrope est facile à résoudre, comme le montrent les résultats du chapitre précédent. Nous avons donc mis au point une paramétrisation qui permet de calculer la solution du problème anisotrope en fonction de la solution du problème isotrope (et de ses dérivées).

5.5 Paramétrisation appliquée au problème elliptique anisotrope

5.5.1 Paramétrisation des matrices de conductivité

Les problèmes numériques apparaissent lorsque le rapport de conductivités γ est grand, c'est-à-dire lorsque $\sigma_{\parallel} \gg \sigma_{\perp}$. Multiplions σ_{\perp} par un paramètre α , de sorte que

$\alpha\sigma_{\perp} \approx \sigma_{\parallel}$, et définissons la matrice de conductivité :

$$\tilde{\sigma}(\alpha; x, y) = P(\theta(x, y)) \begin{bmatrix} \sigma_{\parallel}(x, y) & 0 \\ 0 & \alpha\sigma_{\perp}(x, y) \end{bmatrix} P(-\theta(x, y)).$$

A cette matrice de conductivité est associé le problème $\mathcal{P}(\alpha)$:

$$(\mathcal{P}(\alpha)) \left\{ \begin{array}{lcl} \nabla \cdot (-\tilde{\sigma}(\alpha) \nabla W(x, y)) & = & S(x, y), \quad \forall (x, y) \in \Omega \\ W(x, y) & = & W_a(y), \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_a \\ W(x, y) & = & W_c(y), \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_c \\ (\tilde{\sigma} \nabla W \cdot e_y) & = & 0, \quad \forall (x, y) \in \partial\Omega_0 \cup \partial\Omega_1, \end{array} \right. \quad (5.13)$$

Par souci de simplicité, nous considérons que le rapport des conductivités est constant dans tout le domaine (nous relâcherons cette hypothèse dans des travaux ultérieurs) :

$$(\forall (x, y) \in \mathbb{R}^2) \quad \gamma(x, y) = \frac{\sigma_{\parallel}(x, y)}{\sigma_{\perp}(x, y)} = \bar{\gamma} \in \mathbb{R}$$

Alors dans le cas $\alpha = \bar{\gamma}$:

$$(\forall (x, y) \in \mathbb{R}^2) \quad \tilde{\sigma}(\bar{\gamma}; x, y) = P(\theta(x, y)) \begin{bmatrix} \sigma_{\parallel}(x, y) & 0 \\ 0 & \sigma_{\parallel}(x, y) \end{bmatrix} P(-\theta(x, y)),$$

ce qui signifie que $P(\bar{\gamma})$ est un problème de diffusion isotrope. Notre objectif est donc de calculer la solution de $P(1)$ à partir de la résolution de $P(\bar{\gamma})$. Pour cela nous souhaitons utiliser un développement en puissances de α , et donc nous souhaitons dériver par rapport à α . A ce stade se pose le problème suivant : vaut-il mieux dériver le problème continu et discréteriser le modèle obtenu, ou bien utiliser la discréétisation de $P(\alpha)$ et examiner ses dépendances par rapport à α ?

Dans certains cas il est possible de prouver que les deux opérations (discréétisation et dérivation) commutent, et donc que les deux approches sont équivalentes [28, 43]. Toutefois, nous n'avons pas étudié la question pour notre problème, aussi nous faisons appel à un argument heuristique pour choisir de dériver le problème discréétisé. En effet, nous montrerons dans la section suivante qu'en procédant ainsi, on traite aisément les conditions aux limites, alors qu'il est plus délicat de déterminer l'influence de α sur la prise en compte des conditions de Dirichlet lorsque l'on s'attache à dériver le problème continu $P(\alpha)$.

5.5.2 Discréétisation

Dans cette section, nous donnons quelques résultats nécessaires à la dérivation du problème discréétisé. Puis nous construisons une suite de systèmes linéaires permettant d'extrapoler une approximation de la solution de $P(\alpha)$.

Notations

Nous reprenons les maillages cartésiens du chapitre précédent. Nous notons $\bar{\mathcal{T}}$ un maillage de Ω et $\mathcal{T} \subset \bar{\mathcal{T}}$ la partie du maillage ne contenant pas les points du bord. Nous notons $f_{\mathcal{T}} = (f_i)_{i \in \mathcal{T}}$ le vecteur des valeurs d'une fonction $f : \mathbb{R}^2 \rightarrow E$ en chacun des points du maillage (pour notre usage, $E = \mathbb{R}$ ou $E = \mathcal{M}^2(\mathbb{R})$). Nous notons donc $W_{\mathcal{T}}$ le vecteur $(W_i)_{i \in \mathcal{T}}$ destiné à approximer $W(x, y)$ la solution de ((5.3),(5.4)), et $\sigma_{\mathcal{T}}$ le vecteur des matrices de conductivité en chacun des points du maillage. L'objectif de ce paragraphe est de clarifier les dépendances de la discréétisation du problème de diffusion par rapport aux matrices de conductivité. Soit à résoudre le système linéaire discréétisant ((5.3),(5.4)) :

$$A W_{\mathcal{T}} = b_{\mathcal{T}} - d_{\mathcal{T}}, \quad (5.14)$$

où A est la matrice du système linéaire, $W_{\mathcal{T}}$ est la solution approchée du problème de diffusion, $b_{\mathcal{T}}$ est la prise en compte du second membre de (5.3) et $-d_{\mathcal{T}}$ est la prise en compte des conditions de Dirichlet.

Sur cette base, définissons les fonctions :

$$\begin{aligned} A : \quad \sigma_{\mathcal{T}} &\mapsto (A_{ij})_{(i,j) \in \mathcal{T}^2} \\ b : \quad S &\mapsto (b_i)_{i \in \mathcal{T}} \\ d : \quad W_a, W_c, \sigma_{\bar{\mathcal{T}}} &\mapsto (d_i)_{i \in \mathcal{T}} \end{aligned} \quad (5.15)$$

de sorte que (5.14) s'écrit de manière plus précise :

$$A(\sigma) W_{\mathcal{T}} = b_{\mathcal{T}}(S) - d_{\mathcal{T}}(W_a, W_c, \sigma). \quad (5.16)$$

Remarque 6 *A ne dépend pas de la solution $W_{\mathcal{T}}$ par construction. Dans le cas contraire, on parlerait de schémas non linéaires, dont certains ont des propriétés intéressantes [40] mais qui contraignent à résoudre une équation non linéaire.*

Développement de Taylor

Sur le principe du développement de Taylor de la fonction W

$$W(\alpha; x, y) = \sum_{k=0}^N W^{(k)}(\alpha_0) \frac{(\alpha - \alpha_0)^k}{k!} + \mathcal{O}(\alpha^k)$$

considérons le développement de la discréétisation :

$$\mathcal{W}_{N,\mathcal{T}} = \sum_{k=0}^N W_{\mathcal{T}}^{(k)}(\alpha_0) \frac{(\alpha - \alpha_0)^k}{k!} \quad (5.17)$$

et le développement *exact* :

$$\sigma(\alpha) = \sigma(\alpha_0) + D\sigma \cdot (\alpha - \alpha_0), \quad (5.18)$$

en notant :

$$D\sigma = P(\theta(x, y)) \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{\perp}(x, y) \end{bmatrix} P(-\theta(x, y))$$

Nous allons substituer les développements (5.17) et (5.18) dans l'équation (5.14) afin de trouver les vecteurs $W_{\mathcal{T}}^{(k)}(\alpha_0)$. Pour cela, prouvons le lemme :

Lemme 8 *Soient A , b , et d définis par (5.15). Alors :*

- (i) $\sigma \mapsto A(\sigma)$ est linéaire,
- (ii) $\sigma \mapsto d(W_a, W_c, \sigma)$ est linéaire,
- (iii) Si $S(x, y)$ est une donnée indépendante de α , alors $b_{\mathcal{T}}$ ne dépend pas de α .

preuve : $A(\sigma)$ est la matrice de la discrétisation de (5.3). La linéarité de A par rapport à σ est évidente en se souvenant que nous avons choisi la moyenne arithmétique entre les noeuds du maillage pour construire le schéma (cf section (5.2.2)).

D'autre part, en reprenant la figure 5.4, et les formules données dans les paragraphes 5.2.2 et 5.2.2, d_i s'écrit :

$$d_i = \hat{\sigma}_{xx} \frac{W_{d_2}}{l} - \hat{\sigma}_{xy} \left(\frac{W_{d_3} - W_{d_1}}{4h} \right)$$

où $\hat{\sigma}_{ij}$ est la moyenne arithmétique des σ_{ij} aux noeuds i et d_2 . Comme la moyenne arithmétique est linéaire par rapport à σ , alors d_i est linéaire par rapport à σ et le résultat du lemme en découle.

Enfin, le dernier résultat est évident en rappelant la définition $b = \int_{\Omega_i} S(x, y) ds$.

A présent, prouvons la

Proposition 10 *Si $W_{\mathcal{T}}$ se développe en puissances de $(\alpha - \alpha_0)$ sous la forme :*

$$W_{\mathcal{T}}(\alpha) = \sum_{k=0}^{+\infty} W_{\mathcal{T}}^{(k)}(\alpha_0) \frac{(\alpha - \alpha_0)^k}{k!}$$

alors les vecteurs $W_{k, \mathcal{T}} = \frac{W_{\mathcal{T}}^{(k)}(\alpha_0)}{k!}$ sont solution de :

$$\begin{aligned} A(\sigma(\alpha_0)) W_{0, \mathcal{T}} &= b_{\mathcal{T}} - d_{\mathcal{T}}(W_a, W_c, \sigma(\alpha_0)) \\ A(\sigma(\alpha_0)) W_{1, \mathcal{T}} &= -A(D\sigma(\alpha_0)) W_{0, \mathcal{T}} - d_{\mathcal{T}}(W_a, W_c, D\sigma(\alpha_0)) \\ A(\sigma(\alpha_0)) W_{k, \mathcal{T}} &= -A(D\sigma(\alpha_0)) W_{k-1, \mathcal{T}} \quad k \geq 2 \end{aligned} \quad (5.19)$$

Démonstration : Substituons $W_{\mathcal{T}}(\alpha) = \sum_{k=0}^{+\infty} W_{\mathcal{T}}^{(k)}(\alpha_0) \frac{(\alpha - \alpha_0)^k}{k!}$ et $\sigma(\alpha) = \sigma(\alpha_0) + D\sigma \cdot (\alpha - \alpha_0)$ dans l'équation

$$A(\sigma(\alpha)) W_{\mathcal{T}}(\alpha) = b_{\mathcal{T}}(S) - d_{\mathcal{T}}(W_a, W_c, \sigma(\alpha)).$$

En utilisant la linéarité de A et d par rapport à σ :

$$\begin{aligned} A(\sigma(\alpha)) &= A(\sigma(\alpha_0)) + [A(D\sigma(\alpha_0)) \cdot (\alpha - \alpha_0)] \\ d(\sigma(\alpha)) &= d(\sigma(\alpha_0)) + [d(D\sigma(\alpha_0)) \cdot (\alpha - \alpha_0)], \end{aligned}$$

il vient :

$$\begin{aligned} A(\sigma(\alpha_0)) \sum_{k=0}^{+\infty} W_{\mathcal{T}}^{(k)}(\alpha_0) \frac{(\alpha - \alpha_0)^k}{k!} \\ + A(D\sigma(\alpha_0)) \sum_{k=0}^{+\infty} W_{\mathcal{T}}^{(k)}(\alpha_0) \frac{(\alpha - \alpha_0)^{k+1}}{k!} &= b_{\mathcal{T}}(S) - d(\sigma(\alpha_0)) \\ &\quad - d(D\sigma(\alpha_0)) \cdot (\alpha - \alpha_0) \end{aligned}$$

et en regroupant les facteurs de $(\alpha - \alpha_0)^k$ la proposition en découle.

5.5.3 Résolution

En supposant que l'hypothèse de la proposition 10 est vérifiée, nous décrivons ici le calcul des N premiers termes du développement en puissances de $(\alpha - \alpha_0)$:

$$\mathcal{W}_{N,\mathcal{T}}(\alpha) = \sum_{k=0}^N W_{k,\mathcal{T}} (\alpha - \alpha_0)^k$$

avec $\{W_{k,\mathcal{T}}, k = 0, \dots, N\}$ les solutions des systèmes linéaires (5.19). Le système

$$A(\sigma(\alpha_0)) W_{0,\mathcal{T}} = b_{\mathcal{T}} - d_{\mathcal{T}}(W_a, W_c, \sigma(\alpha_0))$$

est en tous points semblable à ceux rencontrés au chapitre précédent, avec la particularité que $A(\sigma(\alpha_0))$ discrétise une diffusion isotrope. Une fois connu le vecteur $W_{0,\mathcal{T}}$, on effectue le produit matrice-vecteur avec $A(D\sigma(\alpha_0))$ (opération dont le coût en temps de calcul est minime devant la résolution du système linéaire) et on détermine ainsi le second membre du second système :

$$A(\sigma(\alpha_0)) W_{1,\mathcal{T}} = -A(D\sigma(\alpha_0)) W_{0,\mathcal{T}} - d_{\mathcal{T}}(W_a, W_c, D\sigma(\alpha_0))$$

Cette procédure est ensuite itérée pour le calcul de tous les $\{W_{k,\mathcal{T}}, k \geq 2\}$:

$$A(\sigma(\alpha_0)) W_{k,\mathcal{T}} = -A(D\sigma(\alpha_0)) W_{k-1,\mathcal{T}}$$

Remarquons que les systèmes à résoudre ont toujours la même matrice $A(\sigma(\alpha_0))$, et comme dans le chapitre précédent, nous utilisons ici un solveur direct. Or pour des matrices de grande taille, le temps nécessaire à la factorisation de la matrice est grand devant le temps nécessaire pour calculer la solution une fois la matrice factorisée. Aussi, une fois le premier système résolu, toutes les autres résolutions sont relativement peu coûteuses en temps de calcul.

5.6 Résultats numériques

5.6.1 Comparaison avec des solutions approchées

Afin d'étudier la série

$$\mathcal{W}_{N,\mathcal{T}}(\alpha) = \sum_{k=0}^N W_{k,\mathcal{T}} (\alpha - \alpha_0)^k$$

et avant tout son éventuelle convergence vers la discréétisation de la solution de $\mathcal{P}(\alpha)$ défini en (5.13), nous avons besoin de connaître la solution de $\mathcal{P}(\alpha)$. Il ne paraît pas possible de choisir une solution de ce problème de la même façon que nous avons mené les cas tests de la section 5.3. En effet, dans ces tests, nous avons choisi une fonction indépendante du rapport d'anisotropie, et nous avons construit le second membre à partir de cette fonction et des matrices de conductivité (cf section 5.3.1). Le test de la méthode de paramétrisation nécessite au contraire que le second membre soit fixé, et que la solution varie en fonction des matrices de conductivité, donc de α .

De fait, nous avons besoin d'une solution de référence (solution de $\mathcal{P}(\alpha)$), pour un second membre fixé. Nous décrivons notre démarche pour calculer cette solution, que nous notons $W_{\mathcal{T}}$, qui est solution du problème non perturbé, i.e. de $\mathcal{P}(\alpha = 1)$. En posant $\alpha = 1$ et $\alpha_0 = \bar{\gamma}$, l'objet de cette section est donc de présenter des résultats sur la convergence (lorsque N augmente) de $\mathcal{W}_{N,\mathcal{T}}(\alpha)$ vers $W_{\mathcal{T}}$ la solution de référence, et ce pour différentes valeurs de $\bar{\gamma}$. Plus précisément, nous examinons comment varie la suite

$$e_N = \| \mathcal{W}_{N,\mathcal{T}}(\alpha) - W_{\mathcal{T}} \|_{l^\infty}$$

lorsque le nombre de termes N de l'extrapolation augmente.

La première vérification consiste à extrapolier la solution du problème de diffusion pour $\bar{\gamma} = 10$. Ensuite, nous envisageons des rapports d'anisotropie de plus en plus grands. Dans le dernier paragraphe nous examinons l'influence de la largeur de maille sur le calcul de l'extrapolation.

Solution de référence

Pour un rapport d'anisotropie $\bar{\gamma}$ fixé, nous sommes capables de calculer une solution approchée $W_{\mathcal{T}}$. Nous avons vu dans la section 5.3.2 que le calcul est entaché d'une erreur d'autant plus grande que le rapport d'anisotropie est grand. Faute d'un meilleur moyen de tester la méthode de paramétrisation, nous nous proposons de choisir $W_{\mathcal{T}}$ comme solution de référence, avec \mathcal{T} le maillage le plus fin qu'autorise l'ordinateur. En pratique, nous avons pris 310 mailles dans chaque direction, ce qui conduit à un programme occupant près d'un Go en mémoire. Naturellement, la recherche d'une meilleure validation sera au centre de travaux ultérieurs.

Par ailleurs, nous avons souhaité nous rapprocher des conditions de fonctionnement d'un SPT. Pour cela nous avons choisi une géométrie de champ magnétique plus proche de la réalité (figure 5.11), ainsi que des conditions aux limites de l'ordre de grandeur des

potentiels appliqués dans un SPT ($W_a = 100$ et $W_c = 0$). Enfin, nous prenons un second membre typique d'un SPT en fonctionnement, obtenu à l'aide d'un calcul instationnaire [5], et présenté en figure 5.12.

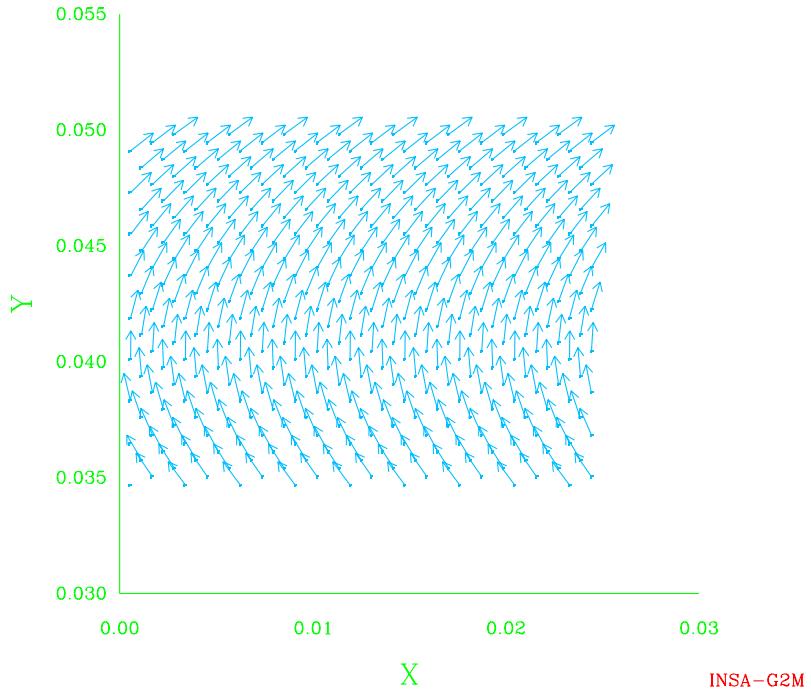


FIG. 5.11 – Champ magnétique choisi pour les tests

Convergence de la série pour $\bar{\gamma} = 10$

Le premier test consiste à extrapoler la solution du problème de diffusion où $\bar{\gamma} = 10$. Nous avons tracé l'évolution de $e_N = \| \mathcal{W}_{N,\mathcal{T}}(\alpha) - W_{\mathcal{T}} \|_{l^\infty}$ en fonction de N (figure 5.13). Rappelons que

$$\mathcal{W}_{N,\mathcal{T}}(\alpha) = \sum_{k=0}^N W_{k,\mathcal{T}} (\alpha - \alpha_0)^k$$

et donc que pour $N = 0$, on lit sur la courbe la distance entre $W_{0,\mathcal{T}}(\alpha_0)$ la solution approchée du problème isotrope et $W_{\mathcal{T}}$ la solution approchée du problème anisotrope.

Remarque 7 *Dans tous les tests numériques auxquels nous avons procédé pour cette section, la solution du problème de diffusion est une fonction majorée par $W_a = 100$ et minorée par une valeur peu inférieure à $W_c = 0$. Ceci est dû à la nature du problème d'une part (qui amène un principe du maximum), et à l'ordre de grandeur du second membre d'autre part. Ainsi on peut considérer que l'ordre de grandeur de la solution est 100 et les ordonnées des figures peuvent s'interpréter comme des pourcentages.*

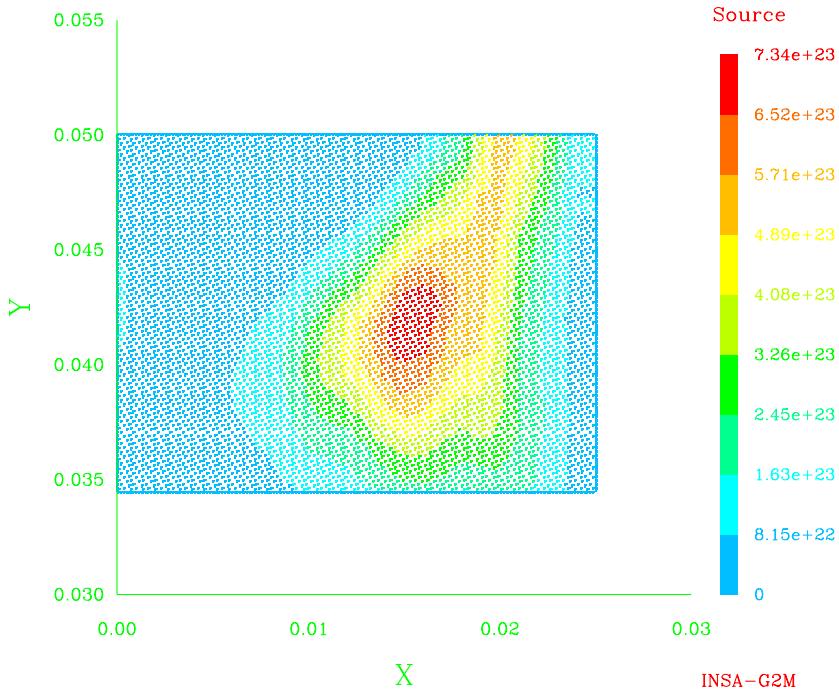


FIG. 5.12 – Second membre réaliste

La lecture de la figure 5.13 montre que l’extrapolation s’approche rapidement de la solution de référence, d’autant que le tracé a été fait en échelle semi-logarithmique. Ce test est donc très satisfaisant et nous incite à examiner les situations où le rapport d’anisotropie est plus fort.

Convergence de la série pour de fortes anisotropies

De la même façon que dans le paragraphe précédent, nous avons calculé des solutions de référence pour $\bar{\gamma} \in \{10^2, 10^3, 10^4, 10^5\}$ et nous les avons comparées avec les solutions calculées par la méthode de paramétrisation. La figure 5.14 présente les résultats obtenus.

Cette figure indique d’une part que les séries $\mathcal{W}_{N,T}(\alpha)$ semblent converger, même lorsque $\bar{\gamma}$ est grand, c’est-à-dire lorsque $(\alpha - \alpha_0) = (1 - \bar{\gamma})$ est grand en valeur absolue. Remarquons qu’en choisissant $\alpha_0 = \bar{\gamma}$ dans chacun des cas, nous nous sommes ramenés à chaque fois à un problème de diffusion isotrope, et qu’en fait, les coefficients de la série $W_{k,T}(\alpha_0)$ sont les mêmes pour toutes les valeurs de $\bar{\gamma}$. Dans ce cas, donc, l’extrapolation est déterminée par les puissances de $(\alpha - \alpha_0)$.

Par contre, la figure 5.14 ne permet ni de confirmer ni d’infirmer la validité de la méthode de paramétrisation. En effet, on peut prévoir que la solution de référence est d’autant plus fausse que $\bar{\gamma}$ est grand (compte tenu des résultats de la section 5.3.2). Ainsi la distance³ entre la solution de référence et une solution correcte du problème de diffu-

³au sens de la norme l^∞ comme pour le calcul de e_N

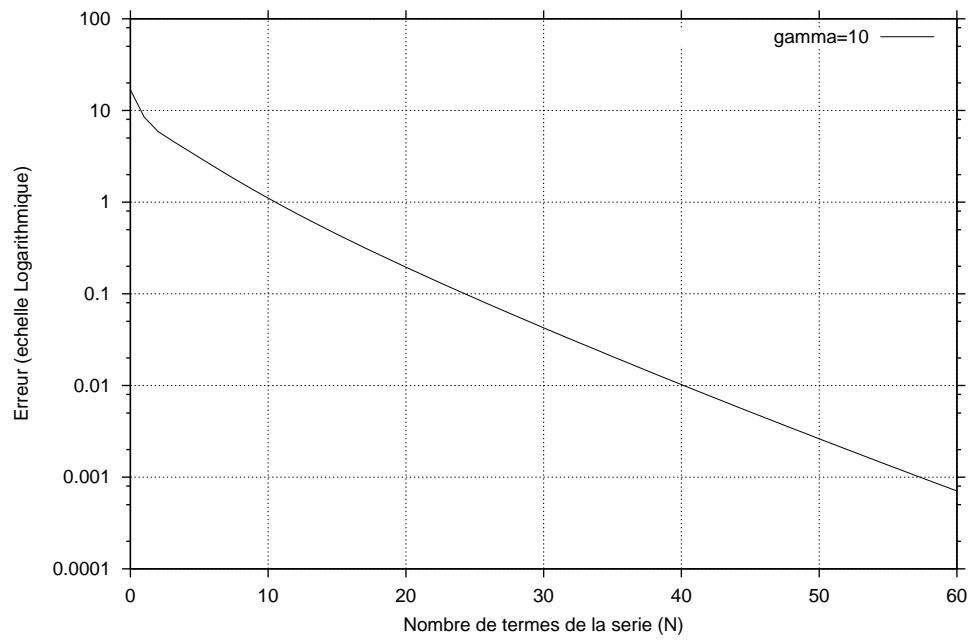
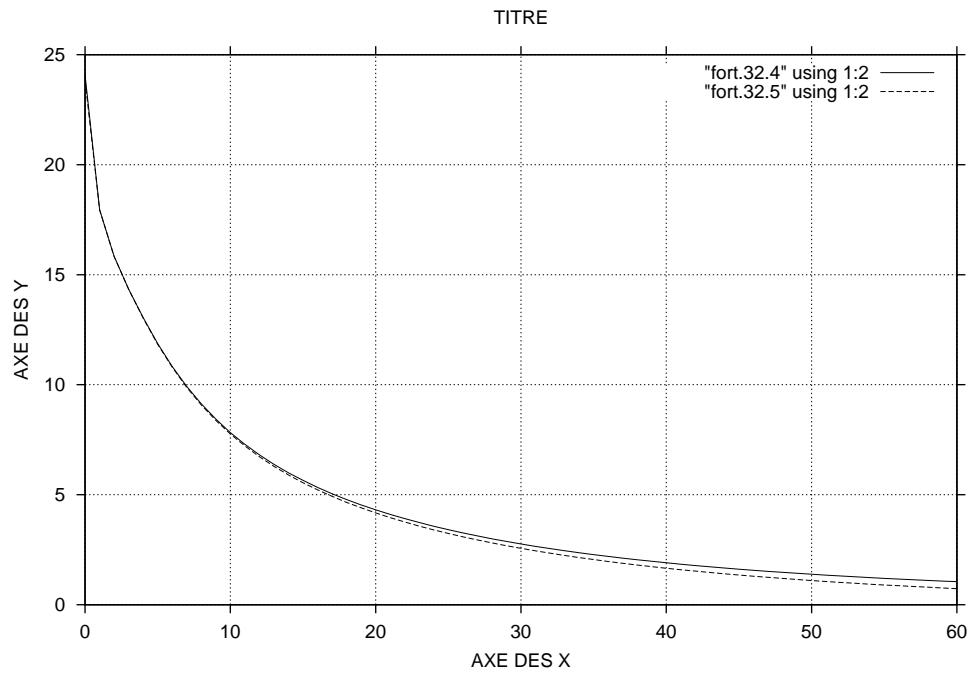


FIG. 5.13 – Evolution de l'erreur en fonction du nombre de termes de la série

FIG. 5.14 – Evolution de l'erreur en fonction du nombre de termes de la série, pour plusieurs valeurs de $\bar{\gamma}$

sion anisotrope peut être importante. Or on peut tout à fait imaginer que l'extrapolation converge vers la solution correcte, donc que la distance avec la solution de référence ne tende pas vers 0.

Ces résultats sont donc encourageants car ils indiquent que la démonstration de la convergence de l'extrapolation peut aboutir. Par contre, la preuve de l'utilité numérique du procédé réclame la mise au point d'un test solide.

Dépendance de l'extrapolation par rapport au maillage

Dans ce paragraphe, nous cherchons à savoir si nous obtenons des résultats comparables en utilisant un maillage plus lâche que celui utilisé jusqu'à présent (310×310). Notons \mathcal{T}_1 un maillage grossier (100×100) de Ω , \mathcal{T}_2 le maillage fin (310×310), et $W_{\mathcal{T}_1}$ l'interpolation de la solution de référence $W_{\mathcal{T}_2}$ sur le maillage grossier. Notons de plus $\mathcal{W}_{N,\mathcal{T}_1}$ l'extrapolation obtenue en utilisant le maillage \mathcal{T}_1 , et $\mathcal{W}_{N,\mathcal{T}_2}$ celle obtenue à l'aide du maillage \mathcal{T}_2 . Nous présentons les comparaisons entre les erreurs :

$$\begin{aligned} e_N^1 &= \| \mathcal{W}_{N,\mathcal{T}_1}(\alpha) - W_{\mathcal{T}_1} \|_{l^\infty} \\ e_N^2 &= \| \mathcal{W}_{N,\mathcal{T}_2}(\alpha) - W_{\mathcal{T}_2} \|_{l^\infty} \end{aligned}$$

Sur la figure 5.15, nous reportons les résultats obtenus pour le cas $\bar{\gamma} = 10$. Les extrapolations obtenues avec le maillage grossier ($\mathcal{W}_{N,\mathcal{T}_1}$) et le maillage fin ($\mathcal{W}_{N,\mathcal{T}_2}$) ne semblent pas converger vers le même vecteur. L'extrapolation $\mathcal{W}_{N,\mathcal{T}_1}$ semble converger vers un vecteur distinct de la solution de référence, alors que $\mathcal{W}_{N,\mathcal{T}_2}$ semble pouvoir s'approcher très près de cette dernière. De plus, e_N^1 décroît plus vite que e_N^2 jusqu'après $N = 15$, puis croît vers une valeur asymptotique. Bien que les séries $\mathcal{W}_{N,\mathcal{T}_i}$ soient à valeur dans un espace vectoriel de grande dimension, la figure 5.16 illustre en deux dimensions une explication plausible à ce phénomène. Malgré tout, bien que l'erreur ne tende pas vers 0, elle se stabilise à une valeur faible. De ce fait, le calcul à l'aide d'un maillage grossier pourrait se substituer au calcul sur un maillage fin, beaucoup plus coûteux en temps de calcul.

Il est possible d'observer le même genre de comportement pour $\bar{\gamma} = 100$, comme l'atteste la figure 5.17, mais en sommant un nombre de termes N beaucoup plus grand. Pour $\bar{\gamma}$ plus élevé, nous avons observé que e_N^1 est plus petit que e_N^2 lorsque $N \leq 60$, mais nous n'avons pas cherché à sommer un plus grand nombre de termes afin de retrouver la croissance de e_N^1 , du fait des problèmes de représentation en machine de nombres tels que 10^5 élevé à la puissance 100 par exemple. Enfin, nous observons que les erreurs sont proches dans tous les cas, rendant le calcul sur maillage grossier intéressant pour le gain en temps de calcul qu'il représente.

5.6.2 Conclusion des tests

Les tests présentés dans cette section nous ont permis de constater que le résultat de la proposition 10 est utilisable pour construire une extrapolation de la solution d'un problème anisotrope à partir de la résolution de problèmes isotropes. De plus, selon

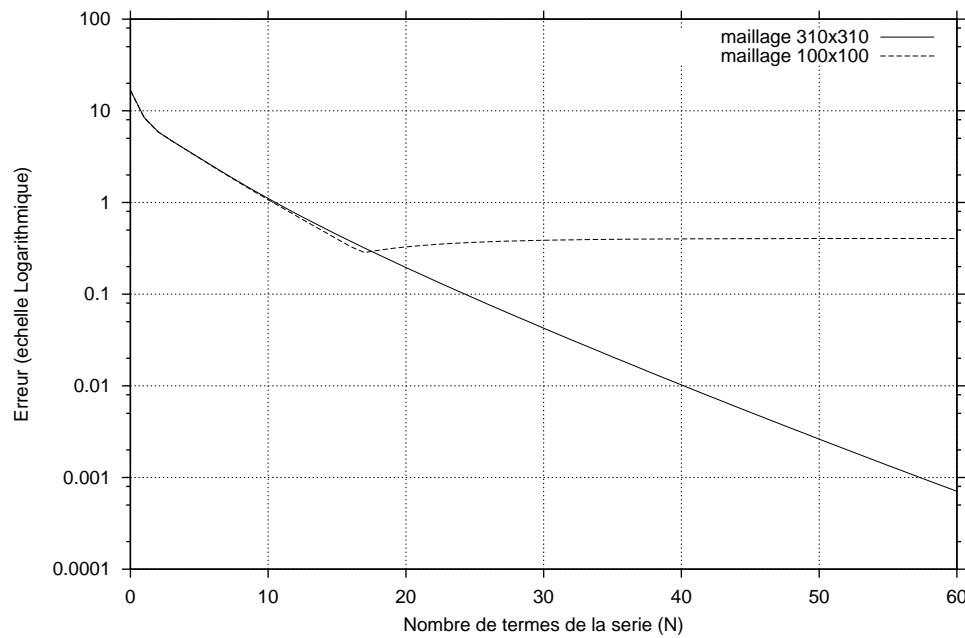


FIG. 5.15 – Evolution de l'erreur en fonction du nombre de termes pour deux maillages différents, $\bar{\gamma} = 10$

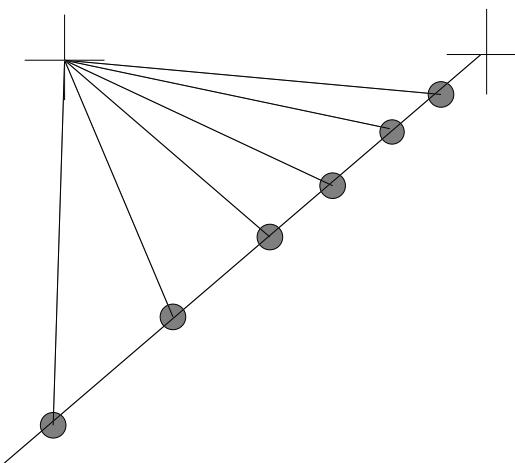


FIG. 5.16 – Si la série converge vers un autre vecteur, la distance avec la solution de référence peut ne pas être monotone

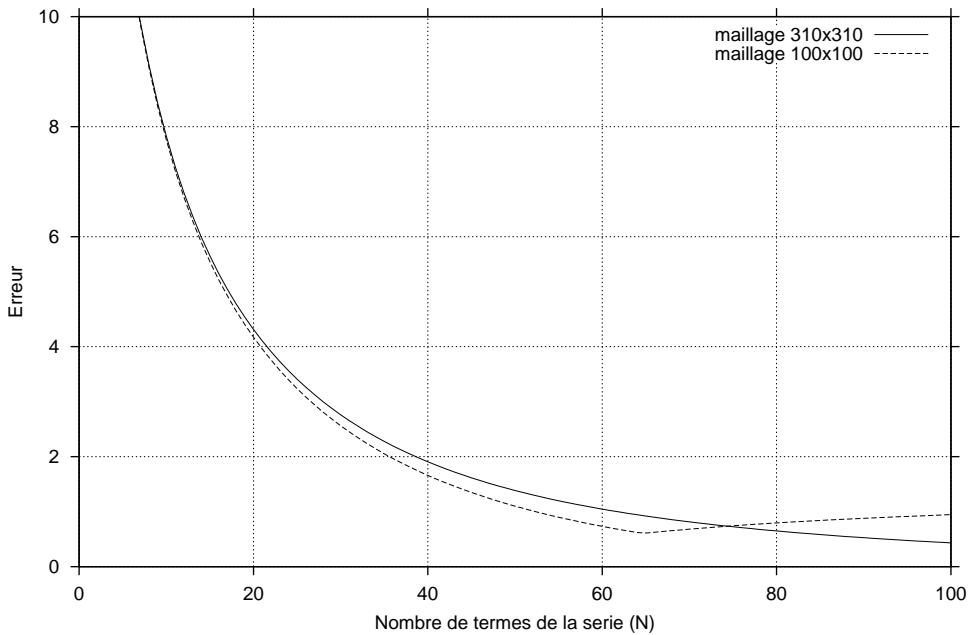


FIG. 5.17 – Evolution de l'erreur en fonction du nombre de termes pour deux maillages différents, $\bar{\gamma} = 100$

que l'on utilise un maillage fin ou plus grossier pour le calcul de la solution extrapolée, on obtient des résultats proches, ce qui peut être intéressant pour diminuer le temps de calcul.

Pour ces raisons, nos travaux futurs termineront la validation de la technique, ce qui nous autorisera à proposer une méthode de résolution de problèmes réels.

Conclusion

Dans cette thèse, nous avons étudié deux problèmes différents.

Lors de l'étude du transport électronique, le développement et l'implémentation d'un modèle SHE a permis d'obtenir des résultats numériques très satisfaisants d'un point de vue qualitatif. Le temps nécessaire à l'exécution du calcul étant plusieurs ordres de grandeur inférieur au temps nécessaire à un code Monte Carlo, ceci ouvre la voie à plusieurs études sur la physique du SPT :

- Le potentiel de gaine est une donnée du modèle, et il peut conduire à un flux de charges depuis ou vers les parois. Celles-ci étant diélectriques, on devrait s'attendre à une modification du potentiel de gaine en conséquence. L'étude de l'établissement et de l'évolution de ce potentiel fait l'objet de travaux récents et on peut envisager de la coupler avec le calcul des distributions électroniques par le modèle SHE.
- L'influence des différents paramètres (tels que l'intensité du champ magnétique ou la valeur du potentiel de gaine) sur la distribution électronique est encore mal comprise. La rapidité de la résolution du modèle SHE permet une étude systématique pour un large éventail de valeurs, et peut donc servir de guide pour l'optimisation du fonctionnement du SPT.

Toutefois, le modèle que nous avons exposé repose sur l'hypothèse que le champ magnétique est purement radial, ce qui n'est qu'une approximation de la réalité. Au lieu de relier les parois par une droite, les lignes de champ magnétique sont légèrement incurvées, et il semble que la courbure du champ magnétique soit essentielle pour optimiser la poussée du SPT. Aussi l'étude d'un modèle SHE pour des champs magnétiques courbes mérite d'être tentée.

Lors de l'étude du potentiel électrique en deux dimensions, nous avons obtenu des résultats très encourageants en conjuguant une méthode de volumes finis et une paramétrisation du problème anisotrope.

Il reste à mettre au point une validation plus nette de la méthode dans les cas que nous avons étudiés, puis traiter des cas réalistes. Pour ce faire, une voie de travail sera peut-être d'examiner l'asymptotique du problème elliptique bidimensionnel lorsque le rapport de conductivité devient grand.

Enfin, le nombre de termes utilisés dans le développement de Taylor s'est révélé élevé. Le développement dans une autre base de fonctions peut conduire à une meilleure

approximation avec un nombre moins élevé de termes et nous envisageons d'explorer cette voie.

Bibliographie

- [1] R. Ababou, *Approaches to large scale unsaturated flow in heterogeneous, stratified, and fractured geologic media*, U.S. Nuclear Regulatory commission report, NUREG/CR-5473 (1991)
- [2] R. Ababou, L.W.Gelhar, C.Hempel, *Serial and parallel performance on large matrix systems*, Cray channels (1992)
- [3] J.C. Adam, A. Héron, rapport de recherche, CPHT (1998)
- [4] C. Bardos, R. Santos and R. Sentis, *Diffusion approximation and computation of the critical size*, Trans. A. M. S., **284** (1984), pp. 617–649.
- [5] J.Bareilles, travaux en cours
- [6] J.P. Boeuf, and L. Garrigues, *Low Frequency Oscillations in a Stationary Plasma Thruster*, Journal of Applied Physics 84, 3541 (1998).
- [7] J.P.Boeuf, L.Garrigues and L.Pitchford, *Modeling of a magnetized plasma : the Stationary Plasma Thruster*, NATO ARW on *Electron kinetics and applications of glow discharges*, Plenum Press (1998)
- [8] J.P.Boeuf, L.Pitchford, *Modélisation d'un propulseur ionique à effet Hall de type SPT*, rapport de recherche CPAT (CNRS ESA 5002) (02/1994)
- [9] F.Brezzi, L.D.Marini, P.Pietra, *Numerical Simulation of semiconductor devices*, Istituto di analisi numerica, pubblicazioni n.608 (1988)
- [10] C.Cercignani, R.Illner, M.Pulvirenti, The mathematical theory of dilute gases, Springer Verlag (1994)
- [11] Compaq Extended Math Library (CXML), Reference Guide
- [12] P.I.Crumpton, G.J.Shaw, A.F.Ware, *Discretisation and multigrid solution of elliptic equations with mixed derivative terms and strongly discontinuous coefficients*, J. Comput. Phys., 166, pp. 343-358 (1995)
- [13] R.Dautray, J.L.Lions, Analyse mathématique et calcul numérique, Masson (1988)
- [14] P.Degond, S.Mas-Gallic, *Existence of solutions and diffusion approximation for a Fokker-Planck equation*, Transp. Theory Stat. Phys., **16**, pp 598-636 (1987)
- [15] P. Degond, *A model of near-wall conductivity and its application to plasma thrusters*, SIAM J. on Appl. Math **58**, 1138 (1998)
- [16] P. Degond, V. Latocha, L. Garrigues, J.P. Boeuf, *Electron Transport in Stationary Plasma Thrusters*, Transp. Theory Stat. Phys. **27**, 203 (1998)

- [17] P. Degond, V. Latocha, L. Garrigues, J.P. Boeuf, *Numerical Simulation of Electron Transport in Stationary Plasma Thrusters*, en préparation
- [18] P. Degond and S. Mancini, *Diffusion driven by collisions with the boundary*, à paraître dans Asymptotic Analysis.
- [19] P. Degond, V. Latocha, S. Mancini, A. Mellet, *Diffusion dynamics of an electron gas confined between two plates*, à paraître dans Methods and applications of analysis
- [20] P. Degond, *Conditions aux limites d'ordre 2 pour le SPT*, manuscrit
- [21] J.L. Delcroix, A. Bers, Physique des plasmas, Interéditions/CNRS Editions (1994)
- [22] R. Eymard, T. Gallouët, R. Herbin, *Finite volume methods*, in Handbook of numerical analysis, P.G. Ciarlet, J.L. Lions eds.
- [23] H. Federer, Geometric measure theory, Springer Verlag (1969)
- [24] L. Garrigues, *Modélisation d'un propulseur à plasma stationnaire pour satellites*, thèse de doctorat de l'université Paul Sabatier, Toulouse (1998)
- [25] Gilbert, Le Vey, Masse, *La différentiation automatique de fonctions représentées par des programmes*, INRIA, Rapport de recherche No. 1557 (1991)
- [26] A. Gnudi, D. Venturi, G. Baccarani, F. Odeh, *Two dimensional MOSFET simulation by means of a multidimensional spherical harmonics expansion of the Boltzmann transport equation*, Solid State Electron., **36** (1993), pp 575-581
- [27] F. Golse, *Knudsen layers from a computational viewpoint*, Transp. Theory Stat. Phys. **21**(3), 211-236 (1992)
- [28] P. Guillaume, *Dérivées d'ordre élevé en conception optimale de forme*, thèse de doctorat, Toulouse (1994)
- [29] C. Hirsch, Numerical Computation of Internal and External Flows, volume 1, Wiley & Sons
- [30] M. Masmoudi, *Outils pour la conception optimale de forme*, thèse d'état, Nice (1987)
- [31] J. Molenaar, *Adaptive multigrid applied to a bipolar transistor problem*, Applied Numerical Mathematics, 17, pp. 61-83 (1995)
- [32] K.W. Morton, Numerical solution of convection-diffusion problems, Chapman & Hall (1996)
- [33] V. Puech, and S. Mizzi, *Collision Cross Sections and Transport Parameters in Neon and Xenon*, J. Phys. D. **24**, 1974 (1991).
- [34] P.A. Raviart, J.M. Thomas, Introduction à l'analyse numérique des équations aux dérivées partielles, Masson (1992)
- [35] Y. Saad, *SPARSKIT : A basic toolkit for sparse matrix computation*, Technical Report 1029, Center for Supercomputing Research and Development, University of Illinois, (1990)

- [36] D.Schroeder, D.Ventura, A.Gnudi, G.Baccarani, *Boundary conditions for Spherical Harmonics Expansion of Boltzmann equation*, Electronic Letters, vol. 28, No. 11 (1992), pp 995-996
- [37] S.Selberherr, Analysis and simulation of semiconductor devices, Springer Verlag, 1984
- [38] C.W.Shu, *Essentially non-oscillatory and weighted essentially non-oscillatory schemes for hyperbolic conservation laws*, ICASE report No. 97-65 (1997)
- [39] D. Thangaraj, A. Nathan, *A rotated monotone difference scheme for the two dimensional anisotropic drift diffusion equation*, J. Comput. Phys. 145, pp 445-461 (1998)
- [40] C. B. Vreugdenhil, B. Koren Eds. Numerical Methods for Advection-Diffusion problems, Vieweg (1993)
- [41] G.Wittum, *Robust Interface Reduction for Highly Anisotropic Elliptic Equations*, in Multigrid Methods V, Springer (1998)
- [42] A.Yamnahakki, *Second order boundary conditions for the drift-diffusion equations of semiconductors*, Math. Models and Meth. in Appl. Sc., vol.5, No. 4 (1995), pp 429-455
- [43] A. Zeglaoui, *Approximation de problèmes singuliers par un développement asymptotique*, thèse de doctorat, Toulouse (2000)

Résumé : La modélisation des propulseurs ioniques de type SPT pose de nombreux problèmes dans le domaine du transport des particules chargées. Nous nous intéressons à deux de ces problèmes, à savoir le transport des électrons et le calcul du potentiel électrique.

Le transport des électrons résulte de l'influence conjuguée des champs (électrique et magnétique) établis dans la cavité du propulseur et des collisions des électrons (dans la cavité et avec la paroi limitant celle-ci). Nous avons participé au développement d'un modèle SHE (Spherical Harmonics Expansion) qui résulte d'une analyse asymptotique de l'équation de Boltzmann munie de conditions de réflexion aux bords. Ce modèle permet d'approcher la fonction de distribution en énergie des électrons en résolvant une équation de diffusion dans un espace {position, énergie}. Plus précisément, nous avons étendu une démarche existante au cas où les collisions en volume (excitation, ionisation) et les collisions inélastiques à la paroi (attachement et émission secondaire) sont prises en compte. Enfin, nous avons écrit un code de résolution du modèle SHE, dont les résultats ont été comparés avec ceux d'une méthode de Monte Carlo.

Dans un deuxième temps, nous avons étudié le calcul du potentiel électrique. La présence du champ magnétique impose d'écrire le courant d'électrons sous la forme $\mathcal{J} = \sigma \nabla W$ où W est le potentiel électrique et le tenseur de conductivité σ est fortement anisotrope compte tenu des grandeurs physiques en jeu dans le SPT. Pour résoudre $\operatorname{div} \mathcal{J}(x, y) = S(x, y)$, nous avons implémenté une méthode de volumes finis sur maillage cartésien permettant de résoudre ce problème elliptique anisotrope, et nous avons vérifié qu'elle échouait lorsque le rapport d'anisotropie devenait grand. Aussi nous avons développé une méthode de paramétrisation, qui consiste à extrapoler la solution d'un problème anisotrope à l'aide d'une suite de problèmes isotropes. Cette méthode a donné des résultats encourageants pour de forts rapports d'anisotropie, et devrait nous permettre d'atteindre des cas réels.

Mots Clés : modèle SHE, modélisation asymptotique, propulsion ionique, Stationary Plasma Thrusters, simulation numérique, diffusion anisotrope, équation de Boltzmann, méthodes de volumes finis.

Abstract : The modelling of the ionic thruster belonging to the SPT class raises many problems of plasma physics. We studied two of them, namely the electron transport and the computation of the electric potential. The electron transport is subject to the influence of the fields (magnetic and electric) set in the channel of the thruster on the one hand, and to the collisions of electrons with heavy species and at the walls on the other hand. We participated to the development of a SHE model (Spherical Harmonics Expansion), which is derived by performing an asymptotic analysis of the Boltzmann equation with a condition that models the reflection at the walls. This model allows to approximate the Electron Energy Distribution Function by solving a diffusion equation in the {position, energy} space, whose scales are macroscopic. More precisely, we extended an existing approach to the case where scattering against atoms are taken into account, as well as inelastic collisions at the walls. Eventually, we compared the implementation of this model to the results of a Monte Carlo simulation. We obtain similar results at a very reduced computational cost. This work lead to three publications, which are incorporated to the thesis.

In a second stage, we studied the computation of the electric field in two dimensions. Due to the presence of a magnetic field, this problem gives rise to an anisotropic elliptic problem. Furthermore, the conductivities along the magnetic field and across the magnetic field lines can differ by several orders of magnitude, thus leading to ill conditioned discretization matrices. We implemented a finite volume scheme and we showed these numerical difficulties. Hence, we improved this method by developing a parametrization allowing us to relate the solution of a highly anisotropic problem to a sequence of isotropic problems. This method proved to behave well and we should be able to treat realistic cases shortly.

Keywords : SHE model, asymptotic analysis, ionic thrusters, Stationary Plasma Thrusters, numerical modelling, anisotropic diffusion, Boltzmann equation, finite volume methods.