POLYPUBLIE

Simulation d'écoulements multi-espèces de plasma avec ablation des parois : applications aux disjoncteurs haute-tension

Alexandre Martin

Document en libre accès dans PolyPublie
Open Access document in PolyPublie

Date	2005
Type	Mémoire ou thèse / Dissertation or Thesis Thèse de doctorat/Ph.D. thesis
URL de PolyPublie PolyPublie URL	https://publications.polymtl.ca/7569/
Conditions d'utilisation Terms of use	© Tous droits réservés / All rights reserved
Référence Citation	Martin, A. (2005). Simulation d'écoulements multi-espèces de plasma avec ablation des parois : applications aux disjoncteurs haute-tension [Thèse de doctorat, École Polytechnique de Montréal]. PolyPublie. https://publications.polymtl.ca/7569/

Détails de la thèse
Thesis details

Directeurs de recherche Advisors	Jean-Yves Trépanier, & Marcelo Reggio
Programme Program	Non spécifié

Ce fichier a été téléchargé à partir de PolyPublie, le dépôt institutionnel de Polytechnique Montréal
This file has been downloaded from PolyPublie, the institutional repository of Polytechnique Montréal
https://publications.polymtl.ca

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

SIMULATION D'ÉCOULEMENTS MULTI-ESPÈCES DE PLASMA AVEC ABLATION DES PAROIS: APPLICATIONS AUX DISJONCTEURS HAUTE-TENSION

ALEXANDRE MARTIN
DÉPARTEMENT DE GÉNIE MÉCANIQUE
ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

THÈSE PRÉSENTÉE EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLÔME DE PHILOSOPHIÆ DOCTOR
(GÉNIE MÉCANIQUE)
SEPTEMBRE 2005

© Alexandre Martin, 2005.

Library and Archives Canada

Published Heritage Branch

395 Wellington Street
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Bibliothèque et Archives Canada

Direction du Patrimoine de l'édition

395, rue Wellington
Ottawa ON K1A 0N4
Canada

Your file Votre référence
ISBN: 978-0-494-17008-3
Our file Notre référence
ISBN: 978-0-494-17008-3

NOTICE:
The author has granted a non-exclusive license allowing Library and Archives Canada to reproduce, publish, archive, preserve, conserve, communicate to the public by telecommunication or on the Internet, loan, distribute and sell theses worldwide, for commercial or non-commercial purposes, in microform, paper, electronic and/or any other formats.

The author retains copyright ownership and moral rights in this thesis. Neither the thesis nor substantial extracts from it may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

AVIS:
L'auteur a accordé une licence non exclusive permettant à la Bibliothèque et Archives Canada de reproduire, publier, archiver, sauvegarder, conserver, transmettre au public par télécommunication ou par l'Internet, prêter, distribuer et vendre des thèses partout dans le monde, à des fins commerciales ou autres, sur support microforme, papier, électronique et/ou autres formats.

L'auteur conserve la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protège cette thèse. Ni la thèse ni des extraits substantiels de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms may have been removed from this thesis.

While these forms may be included in the document page count, their removal does not represent any loss of content from the thesis.

Conformément à la loi canadienne sur la protection de la vie privée, quelques formulaires secondaires ont été enlevés de cette thèse.

Bien que ces formulaires aient inclus dans la pagination, il n'y aura aucun contenu manquant.

Canada

UNIVERSITÉ DE MONTRÉAL

ÉCOLE POLYTECHNIQUE DE MONTRÉAL

Cette thèse intitulée:

SIMULATION D'ÉCOULEMENTS MULTI-ESPÈCES DE PLASMA AVEC ABLATION DES PAROIS: APPLICATIONS AUX DISJONCTEURS HAUTE-TENSION

présentée par: MARTIN Alexandre

en vue de l'obtention du diplôme de: Philosophiæ Doctor

a été dûment acceptée par le jury d'examen constitué de:

M. VASSEUR Patrick, Ph.D., président

M. TRÉPANIER Jean-Yves, Ph.D., membre et directeur de recherche

M. REGGIO Marcelo, Ph.D., membre et codirecteur de recherche

M. PRUD'HOMME Michel, Ph.D., membre

M. JODOIN Bertrand, Ph.D., membre

À mon père, pour m'avoir donné le goût des sciences, et à ma mère, pour m'avoir encouragé à m'y investir.

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier ma conjointe Marie-France qui, tout au long de cette thèse, m'a prodigué un soutien inconditionnel. Ses encouragements passionnés, sa compréhension bienveillante et son intérêt constant, même si en surface, m'ont permis de passer à travers le présent travail d'une façon beaucoup plus agréable. Dans les circonstances, il aurait été impossible de trouver un meilleur appui. De la même façon, je remercie Bernard Strobl d'avoir manifesté une curiosité (du moins apparente) pour ces travaux ; bien que le geste n'a pas eu d'incidence directe, le simple fait de l'avoir posé mérite une reconnaissance. Je tiens aussi à souligner les encouragements fréquents, même si souvent tacites, de mes parents. Sans leur soutien, je ne me serais certainement pas lancé dans cette aventure.

Il serait honteux de passer sous silence l'aide technique et scientifique que m'ont procurée mes collègues de bureau, surtout au CERCA (Centre de Recherche en Calcul Appliqué, maintenant fermé). Tout spécialement Pierre Maruzewki-Gaud, qui m'a officieusement supervisé pendant un an, et qui m'a permis de mettre en perspective mes objectifs de recherche. Il en est de même pour Olivier Richard dont les conseils techniques et scientifiques m'ont insufflé une rigueur tant nécessaire. L'assistance de Jacques Richer est tout aussi importante, puisque sans lui, je serais probablement encore à régler des problèmes informatiques. Je tiens aussi à souligner la collaboration de Fouad Saad qui, le temps d'un été, m'a assisté dans mes recherches.

Plusieurs aspects pratiques de cette thèse n'auraient certainement pas pu être poussés aussi loin sans le soutien de Philippe Robin-Jouhan de chez Areva T & D (anciennement Alstom T & D). Grâce à lui, les travaux ici réalisés ne tomberont pas dans l'oubli (du moins, pas à courte échéance...). Je tiens aussi à souligner l'appui financier de sa société, qui a permis au groupe de recherche de perdurer pendant de nombreuses années. Pour les mêmes raisons, je tiens aussi à remercier le CRSNG

(Conseil de Recherche en Sciences Naturelles et Génie) du soutien financier auquel j'ai eu droit, par le biais de mes professeurs. Il va sans dire que cette thèse n'aurait jamais vu le jour sans cette assistance.

Finalement, je tiens tout spécialement à remercier mes deux professeurs et codirecteurs de recherche, Jean-Yves Trépanier et Marcelo Reggio. Tous deux ont su me faire confiance au cours des cinq dernières années, depuis mon tout premier stage jusqu'à la fin de ce doctorat. Leur soutien respectif m'a été précieux, de même que leur encadrement. De plus, les libertés qu'ils m'ont permis de prendre, ont grandement contribué à ma maturité scientifique. Il va sans dire que leur apport est inestimable et enrichira le reste de ma carrière.

RÉSUMÉ

L'ablation des parois consiste en un phénomène important de l'étude des disjoncteurs haute-tension. Les vapeurs d'ablation, projetées dans la chambre de coupure du disjoncteur, altèrent de façon non négligeable les performances du gaz d'extinction, que ce soit par mélange physique, ou par réactions chimiques. Afin de tenir compte de la présence de ces gaz, un schéma multi-espèces modélisant les équations d'Euler axisymétriques est présenté. Les équations sont résolues selon une approche volumes-finis, basée sur le schéma de Roe. L'apport principal consiste en une formulation nouvelle de la matrice jacobienne, menant à une nouvelle définition de la moyenne de Roe pour la densité. Le schéma est couplé dynamiquement avec une base de données thermodynamiques, permettant ainsi de tenir compte de l'état du plasma. Les résultats obtenus avec le schéma sont comparés à des cas analytiques, théoriques et expérimentaux. Afin de tester le couplage du nouveau schéma avec un algorithme d'ablation, des simulations sont comparées à des résultats expérimentaux, notamment avec un disjoncteur simplifié.

En second lieu, un nouveau modèle d'ablation est présenté. Celui-ci permet de tenir compte des effets transitoires causés par les changements de phases de la paroi. Le nouvel algorithme consiste en un couplage entre un modèle cinétique faisant la transition entre la paroi et le plasma, et les équations de distribution de température dans la paroi. Avec ce nouvel ajout, il est désormais possible de connaître précisément la vitesse du front d'ablation et ainsi de mieux évaluer l'usure du disjoncteur. De plus, la distribution de la température à l'intérieur de la paroi peut elle aussi être calculée. Les résultats du modèle couplé sont comparés avec le modèle d'ablation simplifié. Une simulation de l'interaction entre l'arc électrique et la paroi est aussi présentée.

ABSTRACT

Nozzle wall ablation caused by high temperature electric arcs is studied in the context of high voltage SF_6 circuit-breakers. The gases formed by the ablation mixes with insulating gas, thus modifying the thermodynamic of the problem. For the simulation of these phenomena, an axisymmetric Euler equations model for multi-species flow at LTE has been developed. The governing equations are solved using a finite volume method based on Roe's flux splitting scheme and a new procedure is proposed to obtain the mean-values used in Roe's matrix involving multi-species. The change in the gas composition due to dissociation, ionization and recombinations is taken into account by a dynamic coupling to a thermodynamic database. The formulation is appropriate for a general equation of state. The scheme has been verified by comparisons with the analytical solution of a classic shock tube problem. An experimental validation is also presented, involving the simulation of shock interactions with Helium cylinders and bubbles in air. The scheme is also compared to experimental ablation results, as well as an older version of the software. A simulation of a model circuit-breaker completes the study.

The simplified ablation model used in the scheme has been updated to take into account the unsteady state of ablation. Ablation rate and velocity is now calculated by a kinetic model using two layers of transition, between the bulk plasma and the ablating wall. This model is coupled with a temperature distribution algorithm, thus giving the surface temperature inside the wall. With this new model, the wear of the circuit-breaker can now be accurately computed. The coupled model is compared to the older one, and a simple arc-wall interaction is shown.

TABLE DES MATIÈRES

DÉDICACE iv

REMERCIEMENTS v

RÉSUMÉ vii

ABSTRACT viii

TABLE DES MATIÈRES ix

LISTE DES TABLEAUX xii

LISTE DES FIGURES xiii

LISTE DES ANNEXES xix

LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES xx

INTRODUCTION 1

CHAPITRE 1 MC^3 9

1.1 Résoluteur 9

1.2 Arc électrique 11

1.2.1 Fluide d'extinction 11

1.2.2 Critère de claquage 12

1.2.3 La buse 13

1.3 Phénomènes physiques 14

1.3.1 Effet Joule 14

1.3.2 Transport radiatif 15

1.3.3 Forces de Lorentz 17

1.4 Équation d'état et gaz réel 18
1.5 Ablation 19
1.5.1 L'influence des vapeurs métalliques 25

CHAPITRE 2 RÉSOLUTEUR MULTI-ESPÈCES 26
2.1 Modèle unidimensionnel 26
2.1.1 Équations de base 26
2.1.2 La méthode de Roe 27
2.1.3 Matrice jacobienne 28
2.1.4 Dérivées de la pression 30
2.1.5 La matrice jacobienne 31
2.1.6 Valeurs et vecteurs propres 32
2.1.7 Gaz parfait 36
2.1.8 Gaz réel 39
2.1.9 Résultats et validations 44
2.2 Modèle axisymétrique 49
2.2.1 Les équations 49
2.2.2 Différenciation des équations 52
2.2.3 Termes de pression 54
2.2.4 Matrice jacobienne $\mathcal{A}$ 54
2.2.5 Coefficients TAC 57
2.3 Résultats 58
2.3.1 Tube à choc 58
2.3.2 Cylindre et bulle d'hélium 58
2.3.3 Injection constante d'un gaz dans un tube 60
2.3.4 Simulation d'un disjoncteur expérimental 65
2.4 Ablation multi-espèces 71
2.4.1 Précision sur le modèle 71

2.4.2 Amélioration sommaire au modèle 72
2.4.3 Résultats : tube de Ruchti 73

CHAPITRE 3 COUPLAGE PAROI-PLASMA 76
3.1 Modèle de Keidar 76
3.1.1 Couche de Knudsen 78
3.1.2 Couche hydrodynamique 80
3.1.3 Le modèle 80
3.1.4 Validation 81
3.1.5 Critiques et corrections 83
3.2 Distribution de chaleur dans la paroi 85
3.3 Couplage 88
3.4 Validations et résultats 91
3.4.1 Comparaison avec l'ancien modèle 91
3.4.2 Conditions d'utilisation du nouveau modèle 98

CONCLUSION 103

RÉFÉRENCES 105

ANNEXES 111

LISTE DES TABLEAUX

TAB. 2.1 *Première validation : conditions initiales* 44
TAB. 2.2 *Deuxième validation : conditions initiales* 46
TAB. 2.3 *Troisième validation : conditions initiales* 49
TAB. 2.4 *Quatrième validation : conditions initiales* 49
TAB. 2.5 *Conditions initiales pour le tube à choc axisymétrique* 58
TAB. 2.6 *Différence entre les valeurs théoriques et calculées* 65
TAB. 3.1 *Propriétés du PTFE* 92

LISTE DES FIGURES

FIG. 1 *Disjoncteur SF_6 à haut-voltage, en fonction sur un réseau électrique* 2

FIG. 2 *Composantes d'un disjoncteur* 3

FIG. 3 *Processus de coupure du courant par un disjoncteur (figure tirée de Godin (1998))* 4

FIG. 4 *Simulation par le logiciel MC^3 de la coupure du courant dans un disjoncteur (plan de coupe axisymétrique).* 5

FIG. 1.1 *R en fonction de la température et de la densité pour N_2* . . 19

FIG. 1.2 *Pression en fonction de la température et de la densité pour N_2* 20

FIG. 1.3 *$\frac{\partial P}{\partial e}$ en fonction de la température et de la densité pour N_2* . 20

FIG. 1.4 *$\frac{\partial P}{\partial \rho}$ en fonction de la température et de la densité pour N_2* . 21

FIG. 1.5 *Diagramme des enthalpies du PTFE (figure tirée de Godin et al. (2000))* 23

FIG. 2.1 *Première validation : tube à choc unidimensionnel avec de l'azote de chaque côté* 45

FIG. 2.2 *Deuxième validation : tube à choc avec de l'air à gauche et du SF_6 à droite* 47

FIG. 2.3 *Troisième validation : tube à choc avec de l'air multi-espèces à gauche et de l'air mono-espèce à droite* 48

FIG. 2.4 *Quatrième validation : tube à choc avec deux gaz différents de chaque côté, mais à des conditions initiales identiques* . 50

FIG. 2.5 *Densité adimensionnelle pour le tube à choc axisymétrique (les valeurs sont prises à la paroi du tube).* 59

FIG. 2.6 *Température et pression adimensionnelles pour le tube à choc axisymétrique (les valeurs sont prises à la paroi du tube).* . . 59

FIG. 2.7 *Simulation d'une bulle d'hélium traversée par un choc de grandeur $M_s = 1.25$ (52 isolignes de densité, entre 0.001 et ≈ 0.025 kg/m^3), comparée aux photographies de Hass et Sturtevant (1987) ; (a) $t = 20$ μs, (b) $t = 82$ μs, (c) $t = 145$ μs, (d) $t = 223$ μs, (e) $t = 350$ μs, (f) $t = 600$ μs* 61

FIG. 2.8 *Propagation de la frontière avant et arrière de la bulle d'hélium après le passage d'un choc de $M_s = 1.25$: comparaison entre la simulation et les résultats expérimentaux de Hass et Sturtevant (1987)* 62

FIG. 2.9 *Simulation d'un cylindre d'hélium traversé par un choc de grandeur $M_s = 1.22$ (52 isolignes de densité, entre 0.001 et ≈ 0.025 kg/m^3), comparée aux photographies de Hass et Sturtevant (1987) : (a) $t = 32$ μs, (b) $t = 52$ μs, (c) $t = 62$ μs, (d) $t = 72$ μs, (e) $t = 82$ μs, (f) $t = 102$ μs* 63

FIG. 2.10 *Simulation d'un cylindre d'hélium traversé par un choc de grandeur $M_s = 1.22$ (52 isolignes de densité, entre 0.001 et ≈ 0.025 kg/m^3), comparée aux photographies de Hass et Sturtevant (1987) : (g) $t = 245$ μs, (h) $t = 427$ μs, (i) $t = 674$ μs, (j) $t = 983$ μs* 64

FIG. 2.11 *Simulation d'un cylindre d'hélium traversé par un choc de grandeur $M_s = 1.22$ (52 isolignes de pression, de 1.01 à 1.85 bar), comparée aux photographies de Hass et Sturtevant (1987) : (a) $t = 72$ μs, (b) $t = 102$ μs* 64

FIG. 2.12 *Distribution de la pression à différents temps* 65

FIG. 2.13 *Fraction massique des gaz à $t = 1s$ et $t = 3s$* 66

FIG. 2.14 *Distribution de la densité pour différents temps* 66

FIG. 2.15 *Distribution de la température pour différents temps* 67

FIG. 2.16 *Densité du PTFE ablaté dans le disjoncteur de Lewis, avec un arc de 300A, à t=1.6 ms. Les valeurs vont de 0 à 0.02 kg/m^3, alors que pour le SF_6, elles ont une valeur maximale de 44 kg/m^3* 69

FIG. 2.17 *Évolution de la pression pour un courant sinusoïdal de 56 kA. Les mesures sont prises à -80 mm et -5 mm de l'étranglement de la buse (conditions frontières de Marshak pour le calcul radiatif du site P1, Dirichlet pour le site P2)* 69

FIG. 2.18 *Évolution de la pression pour un courant sinusoïdal de 56 kA. Les mesures sont prises à -0 mm et -36 mm de l'étranglement de la buse (conditions frontières de Dirichlet pour le calcul radiatif)* 70

FIG. 2.19 *Évolution du voltage de l'arc pour un courant sinusoïdal de 56 kA* 70

FIG. 2.20 *Température de vaporisation en fonction de la pression ambiante pour le PTFE, selon la relation de Clausius-Clapeyron.* 73

FIG. 2.21 *Pression totale adimensionnelle en fonction de la longueur du tube L, du rayon du tube R, de la pression à la sortie p_0 et du courant de l'arc I pour différentes valeurs de f et T_V. Les résultats sont comparés aux données expérimentales de Ruchti et Niemeyer (1986) et aux simulations faites par Godin et al. (2000)* 74

FIG. 2.22 *Champ électrique E en fonction du rayon du tube R et du courant de l'arc I pour différentes valeurs de f et T_V. Les résultats sont comparés aux données expérimentales de Ruchti et Niemeyer (1986) et aux simulations faites par Godin et al. (2000)* 75

FIG. 2.23 *Taux d'ablation $\dot{m}$ en fonction du rayon du tube R et du courant de l'arc I pour différentes valeurs de f et T_V. Les résultats sont comparés aux données expérimentales de Ruchti et Niemeyer (1986) et aux simulations faites par Godin et al. (2000)* 75

FIG. 3.1 *Domaine de calcul pour le modèle d'ablation de Keidar* . . . 77

FIG. 3.2 *Comparaison entre le modèle analytique et des simulations de type DSMC : Pourcentage de particules qui retournent à la paroi en fonction de la vitesse (nombre de Mach) à la frontière de la couche, pour différentes distances de la paroi (figure tirée de Keidar et al. (2001))*. 81

FIG. 3.3 *Comparaison entre le modèle analytique et des simulations de type DSMC : Variation de la fonction de distribution de vitesse des particules qui retournent à la paroi, en fonction de leur vitesse (nombre de Mach), pour différentes distances de la paroi (figures tirées de Keidar et al. (2001)). (a) Vitesse à la frontière : $u_b = \sqrt{5k_BT_b/3m}$; (b) Vitesse à la frontière : $u_b = 0.1\sqrt{2k_BT_b/m}$* 82

FIG. 3.4 *Taux d'ablation en fonction de la température électronique du plasma T_c, à une densité constante $n_c = 10^{24}$ m^{-3}*. 84

FIG. 3.5 *Nombre de Mach à l'interface entre la couche de Knudsen et la couche hors équilibre, en fonction de la température électronique du plasma T_c, à une densité constante $n_c = 10^{24}$ m^{-3}*. 85

FIG. 3.6 *Discrétisation en espace du schéma de type différences-finies explicite*. 87

FIG. 3.7 *Température à la surface d'un bloc de glace se liquéfiant (tirée de (Voller et Cross 1981)) : différentes méthodes de calcul.* 89

FIG. 3.8 *Oscillations causées par un pas de temps trop petit ou une discrétisation trop grande.* 90
FIG. 3.9 *Vitesse du front d'ablation en fonction du temps, pour les deux méthodes de calcul.* 93
FIG. 3.10 *Pourcentage de la différence de la vitesse du front d'ablation pour les deux techniques de calcul.* 94
FIG. 3.11 *Évolution temporelle de la quantité de matière ablatée, pour les deux méthodes de calcul.* 94
FIG. 3.12 *Évolution temporelle de l'érosion de la surface des suites de l'ablation, pour les deux méthodes de calcul.* 95
FIG. 3.13 *Évolution temporelle de l'érosion de la surface des suites de l'ablation, pour les deux méthodes de calcul ; emphase sur les premiers moments du calcul.* 95
FIG. 3.14 *Évolution temporelle de la température de la surface.* 96
FIG. 3.15 *Évolution temporelle de la température de la surface ; emphase sur les premiers moments du calcul.* 96
FIG. 3.16 *Distribution de la température à l'intérieur de la paroi.* . . . 97
FIG. 3.17 *Distribution de la température à l'intérieur de la paroi.* . . . 97
FIG. 3.18 *Intégration du modèle couplé dans le logiciel MC^3* 98
FIG. 3.19 *Température à la paroi à différents endroits du tube.* 99
FIG. 3.20 *Taux d'ablation à différents endroits du tube.* 100
FIG. 3.21 *Usure du tube à différents endroits.* 100
FIG. 3.22 *Historique de la température de la couche plasma.* 101
FIG. 3.23 *Température à la paroi calculée avec le modèle simplifié (section 2.4) et calculée avec le modèle couplé.* 101
FIG. I.1 *Évolution du système dans le plan densité-température (figure tirée de Perez et Lewis (2002))* 112
FIG. III.1 *Étapes menant au régime permanent de l'ablation d'une paroi.* 124

FIG. III.2 *Systèmes de coordonnées x et z pour le calcul de la distribution de la température à l'intérieur de la paroi* 125

LISTE DES ANNEXES

ANNEXE I EXPLOSION DE PHASE 111

ANNEXE II L'ÉQUATION DE LIOUVILLE 114

II.1 L'état d'un système 114

II.2 Variables conjuguées 115

II.3 Hamiltonien 116

II.4 Système d'équations de BBGKY 118

II.5 Équation de Boltzmann 121

ANNEXE III ABLATION EN RÉGIME PERMANENT 123

ANNEXE IV ÉVALUATION DES INVARIANTS INTÉGRAUX 129

IV.1 Conservation de la quantité de mouvement 129

IV.2 Conservation de l'énergie 131

IV.3 Conservation du flux de l'énergie thermique 133

LISTE DES NOTATIONS ET DES SYMBOLES

Abbréviations

CFD	Computational Fluid Dynamic
CFDRC	Computational Fluid Dynamic Research Corporation
CFL	Paramètre de Courant, Freidricks et Levy
DSMC	Simulation directe Monte-Carlo
lpm	Libre parcours moyen
MC^3	Modélisation et Calcul de Coupure de Courant
NEC	Net Emission Coefficient
PPT	Pulsed Plasma Thruster
PTFE	Poly-Tetra-Fluoro-Ethylène (Teflon© ou C_2F_4)
TAC	Total Absorption Coefficient

Caractères usuels

a	Épaisseur de la zone fondue de la paroi
$\mathcal{A}$	Matrice jacobienne
$\mathbf{B}$, B	Densité du flux magnétique
c	Vitesse de la lumière
c_p	Chaleur spécifique à pression constante
c_v	Chaleur spécifique à volume constant
$\mathcal{C}$	Matrice paramétrique du vecteur de flux $\mathbf{F}$
$\mathcal{D}$	Matrice des valeurs propres
$\mathcal{D}$	Probabilité d'état avec variables conjugées

D	Probabilité d'état
$\mathbf{E}$, E	Champ électrique
E	Énergie totale
$\mathbf{e}_i$	Vecteurs propres i
e	Énergie interne
e_{1000}	Énergie interne à 1000 K
e_{3500}	Énergie interne à 3500 K
f	Fonction d'évaluation de probabilité
f	Fonction de distribution de vitesse
f	Proportion de la radiation contribuant à l'ablation
$\mathbf{F}$	Vecteur de flux
G	Rayonnement incident
δh_a	Énergie nécessaire à chauffer le gaz évaporé
h_v	Enthalpie de vaporisation
δh_a	Énergie de la vapeur d'ablation
H	Enthalpie
$\mathbf{H}$, H	Champ magnétique auto-induit
H	Hamiltonien
H	Enthalpie
I_b	Intensité radiative d'un corps noir
I	Intensité radiative
$\mathbf{J}$, J	Densité de courant
J	Terme de collision
k	Conductivité thermique
k_B	Constante de Boltzman
K	Constante d'équilibre (≈ 18)

$\mathcal{L}$	Matrices des vecteurs propres
L	Longueur du côté d'une maille
L_L	Chaleur latente de liquéfaction
L_V	Chaleur latente de vaporisation
$\dot{m}$	Débit massique d'ablation
m	Masse
M	Nombre de Mach
$\mathcal{M}$	Matrice paramétrique du vecteur des propriétés $\mathbf{U}$
M_s	Grandeur du choc
N	Densité du fluide
N	Nombre total de particules dans le gaz
$\mathbf{n}$, n	Direction
n	Nombre de particules (densité)
p	Variable conjuguée de la quantité de mouvement
P	Pression
P_e	Dérivée de la pression par rapport à l'énergie
P_ρ	Dérivée de la pression par rapport à la densité
Q_{rad}	Radiation incidente
$\mathbf{q}$	Flux de chaleur
q	Variable conjuguée de la position
$\mathbf{r}$	Vecteur position d'une particule
r	Position radiale
R	Constante des gaz
s	Entropie
$\mathbf{s}$	Vecteur de direction
S_k	Surface engendrée par le côté k d'une maille

$\mathbf{S}$	Vecteur des termes sources
S_B	Terme source du champ électrique
S_L	Terme source d'ablation pour la quantité de mouvement
S_m	Terme source d'ablation de la conservation de la masse
S_{abl}	Terme source d'ablation pour l'énergie
S_{ohm}	Terme source d'énergie ohmique
S_{rad}	Terme source d'énergie radiative
t	Temps
T	Température
T_V	Température de vaporisation
T_L	Température de liquéfaction
U	Vitesse du front d'ablation
$\mathbf{U}$	Vecteur des propriétés
u	Vitesse
V	Volume d'une maille
v	Vitesse du gaz d'ablation
$\mathbf{w}$,w	Vitesse d'une particule
$\mathbf{W}$	Vecteur paramètre
$\mathbf{X}$	Ensemble des forces agissant sur une particule
x	Distance à l'intérieur de la paroi ; référentiel fixe
y_n	Fraction massique de l'espèce n
z	Distance à l'intérieur de la paroi ; référentiel du front d'ablation
z	Position axiale

Caractères grecs

α	Coefficient d'ionisation
α	Inverse de la distance de pénétration optique
α	Fonction de pondération de la distribution de vitesse
β	Proportion de particules retournant vers la paroi
ϵ_w	Émissivité du mur
ϵ_0	Permittivité du vide
η	Coefficient d'attachement électronique
γ	Rapport des chaleurs spécifiques
κ	$1 - \gamma$
κ	Coefficient d'absorption radiatif
λ_i	Valeurs propres
μ_0	Perméabilité du vide
Ω	Angle solide
Φ	Fonction de phase de dispersion
ϕ	Fonction scalaire du champ électrique
ϕ	Ensemble des forces externes sur une particule
Ψ	Température calibrée dans la partie solide de la paroi
ρ	Densité totale
ρ_n	Densité de l'espèce n
σ	Conductivité électrique
Σ_w	Élément de surface
τ_s	Temps pour mettre les atomes en mouvement
τ_{th}	Temps seuil pour une diffusion thermique significative
τ_L^c	Durée maximale du pulse d'énergie
Θ	Température calibrée dans la partie liquide de la paroi
ζ	Paramètre de dégénérescence des vecteurs propres

Indices

a	Frontière de la couche Knudsen et de la paroi
b	Frontière des couches Knudsen et hydrodynamique
c	Frontière des couches hydrodynamique et plasma
i	Particule
i, j	Espèce gazeuse
j	Discrétisation en espace
k	Côté d'une maille
n	Direction normale
L	État du fluide à gauche
l	Bandes spectrales
l	Phase liquide
R	État du fluide à droite
r	Direction radiale
s	Phase solide
t	Discrétisation en temps
t	Direction tangentielle
z	Direction axiale
λ	Longueur d'onde
θ	Direction azimutale

INTRODUCTION

Depuis l'avènement des circuits électriques haute-tension, la coupure du courant constitue une préoccupation majeure lors de l'élaboration et de l'entretien de réseaux électriques efficaces. Dans le but de faciliter cette tâche, un appareil, nommé disjoncteur, est utilisé (figure (1)). De façon simpliste, on peut décrire cet appareil comme une cloison cylindrique hermétique protégeant deux électrodes en contact. Pour interrompre le courant, il suffit donc, en théorie, de séparer les deux électrodes. En pratique, par contre, les choses ne sont pas des plus aisées. Lors de la séparation des deux électrodes, le courant est si fort que le gaz s'ionise ; il s'ensuit un claquage, et un arc électrique apparaît. Pendant toute la durée de cet arc, même si les électrodes ne se touchent physiquement plus, le courant continue de circuler. Il est donc impératif de l'éteindre le plus rapidement possible, à l'aide de divers mécanismes. À l'heure présente, la méthode la plus utilisée est celle qui consiste à souffler directement sur l'arc un gaz non réactif, la plupart du temps du SF_6. On peut voir sur la figure (2) des photographies des composantes principales du disjoncteur. L'illustration (3) explique en détail la nature de ces composantes ainsi que le processus de coupure du courant. Les figures (4a) à (4d) montrent, quant à elles, le même processus, mais simulé par un logiciel de mécanique des fluides assistés par ordinateur (en anglais, «Computational Fluid Dynamics» ou CFD).

Lors du fonctionnement normal d'un disjoncteur, plusieurs conditions assurent une extinction efficace de l'arc. Tout d'abord, la chambre de coupure doit être maintenue à une pression suffisante. De plus, comme l'arc doit être éteint le plus rapidement possible, le gaz est accéléré à des vitesses supersoniques, ce qui nécessite une buse convergente-divergente autour des électrodes (voir figure (3b)). Ainsi, pour modéliser ces phénomènes de façon adéquate, on doit traiter le gaz comme étant compressible. Pour simuler numériquement ce type d'écoulement, plusieurs schémas ont été proposés au cours des 40 dernières années. Un des plus célèbres

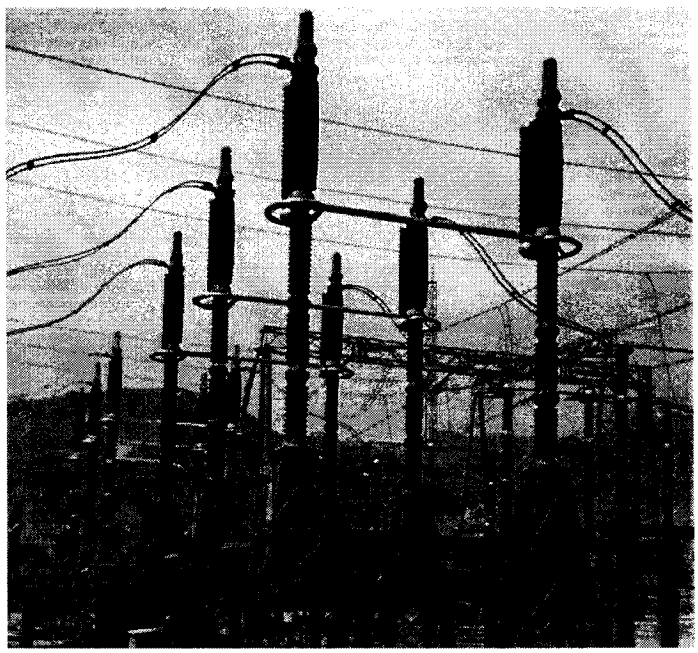
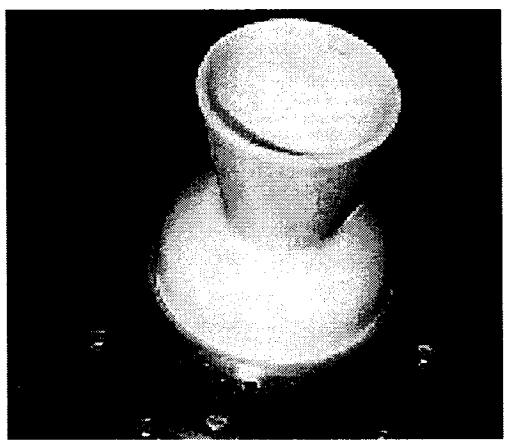


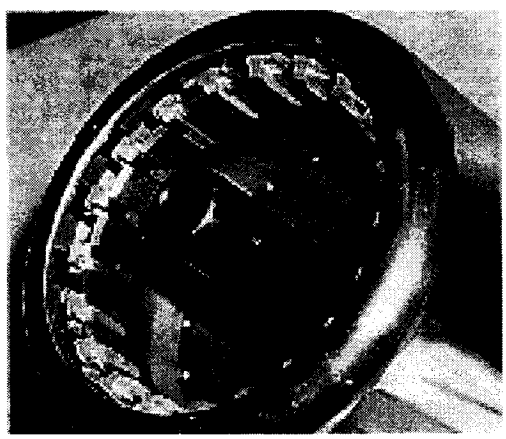
FIG. 1 *Disjoncteur SF_6 à haut-voltage, en fonction sur un réseau électrique*

et des plus utilisés est sans doute celui développé par Roe (1981). Il se distingue particulièrement par sa robustesse, sa simplicité, ainsi que sa facilité d'utilisation.

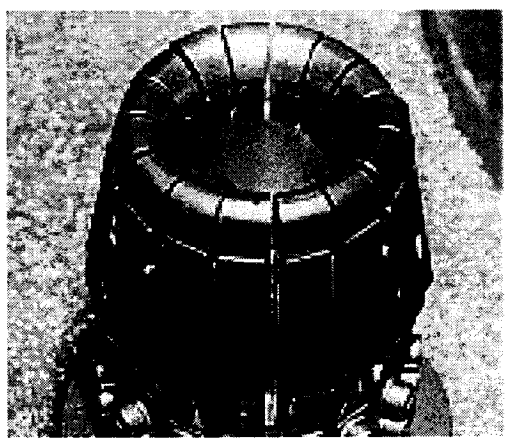
En plus de permettre au courant de continuer de passer, l'arc électrique cause maints inconvénients, par sa température élevée (jusqu'à 30 000 K) ainsi que par sa puissance. En premier lieu, il détruit tout ce qu'il touche ; les parois du disjoncteur sont ablatées et les électrodes fondent. Ensuite, les vapeurs d'ablation qui sont projetées dans la chambre de coupure du disjoncteur altèrent de façon non négligeable les performances du gaz d'extinction, que ce soit par mélange physique, ou par réactions chimiques (dissociations, ionisations, recombinaisons, corrosion, etc.). Les phénomènes thermodynamiques présents ne permettent donc pas l'utilisation d'une équation d'état empirique, que ce soit celle pour un gaz parfait ou une autre. Afin de tenir compte des conditions d'opération et des interactions entre les différentes espèces, une technique efficace de calcul thermodynamique a



(a) *Buse convergente-divergente*



(b) *Anode (poireau)*



(c) *Cathode (tulipe)*

FIG. 2 *Composantes d'un disjoncteur*

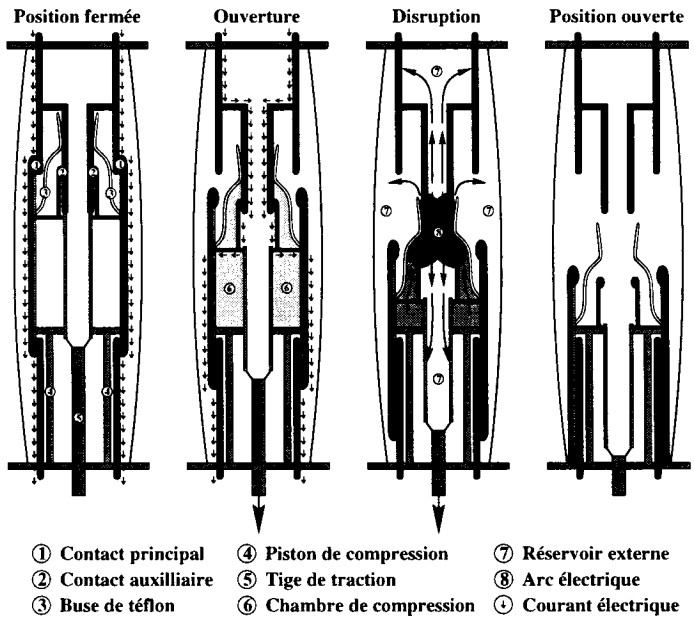
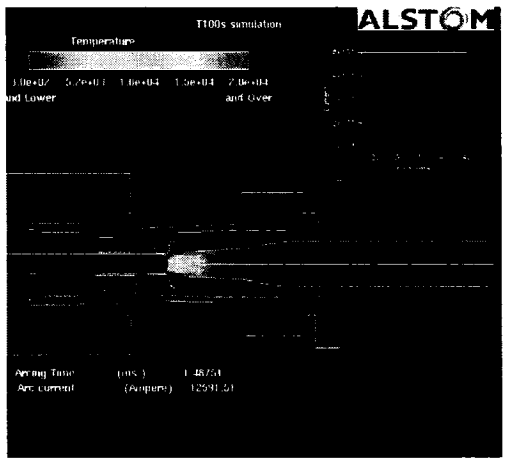


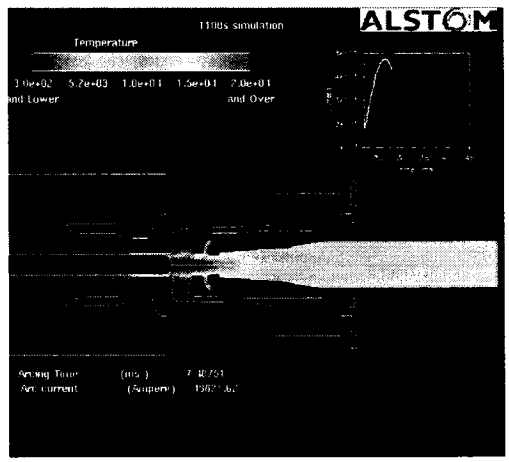
FIG. 3 *Processus de coupure du courant par un disjoncteur (figure tirée de Godin (1998))*

été mise sur pied par Godin (1998). Cependant, dans un contexte de simulation numérique, il demeure impensable de lier dynamiquement le schéma à ce calcul ; le couplage se fait donc au moyen d'interpolations dans une base de données, générée au préalable. Grâce à ce couplage, il est ainsi possible de déterminer les propriétés thermodynamiques d'un mélange en fonction de son énergie interne, de sa densité ainsi que de sa composition. Le calcul de l'émission radiative, élément important de la modélisation de l'arc, peut aussi bénéficier de cette prise en considération des gaz d'ablation puisque les coefficients nécessaires à la résolution de l'équation de transport radiatif peuvent être exprimés en fonction de la composition du gaz.

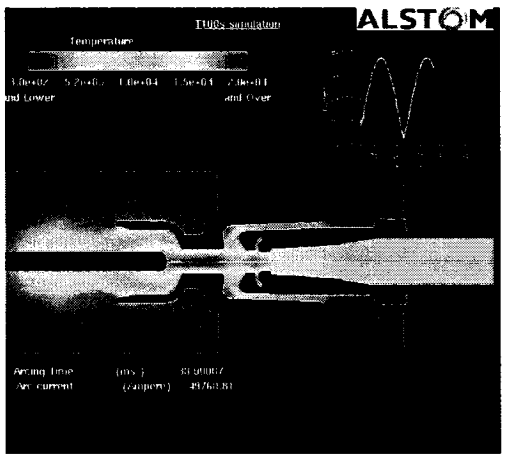
Afin de simuler correctement le comportement des disjoncteurs, il est nécessaire de tenir compte de l'effet de ces gaz, ce qui nécessite une modification au schéma numérique. Abgrall (1994) et Shuen *et al.* (1990) proposent des extensions du schéma de Roe qui tiennent compte des espèces ; par contre, dans les deux cas,



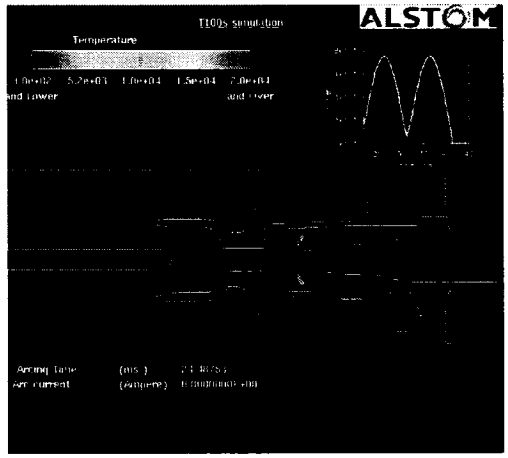
(a) *Position fermée*



(b) *Ouverture, avec début d'arc électrique*



(c) *Arc électrique développé, avec début d'extincton*



(d) *Position ouverte, avec arc électrique éteint*

FIG. 4 *Simulation par le logiciel MC*[8] *de la coupure du courant dans un disjoncteur (plan de coupe axisymétrique).*

un problème de robustesse est présent, problème causé par une fraction massique négative lors du calcul des flux. Mehlman (1991) et Larrouturou (1990) présentent des solutions à ce problème : cependant, la formulation utilisée complique le traitement des équations, notamment au niveau des termes de pressions. Plusieurs variations de ces modèles existent, par exemple celui de Fedkiw *et al.* (1997), basé sur le schéma de Osher et Solomon (1982), ou celui de Degrez (Barbante *et al.* 1999), basé sur le schéma de Liou (1996), mieux connu sur le nom d'AUSM. Malheureusement, ces derniers modèles n'offrent pas la précision et la robustesse nécessaire au problème ici décrit. Par exemple, la famille de modèles non conservatifs de Fedkiw *et al.* (1997) pallie à certains problèmes particuliers ; cependant, le résoluteur est instable lors d'un usage généralisé. L'élaboration d'un schéma simple, précis, robuste, efficace et utilisable dans un contexte de simulations complexes reste donc à produire. Le premier objectif de cette thèse est de proposer un schéma ayant ces qualités et qui, une fois couplé avec la base de données thermodynamiques et radiatives, mettra en lumière l'importance de la simulation des gaz d'ablation.

Puisque ces gaz d'ablation ont une incidence non négligeable sur le fonctionnement des disjoncteurs, il est d'autant plus important de s'assurer de la précision du modèle d'ablation. Afin d'évaluer le taux de matière ablatée, un simple bilan énergétique, calculé à la paroi, est nécessaire. Cette méthodologie est d'ailleurs validée expérimentalement par Ruchti et Niemeyer (1986) et par Noeske (1977). Cependant, ce calcul ne tient pas compte des effets transitoires à la paroi. De récents développements dans une discipline connexe peuvent être mis à contribution pour en obtenir une meilleure évaluation. Une approche, élaborée par Beilis (1985), puis modifiée par Keidar *et al.* (2001), est basée sur un modèle de couches développé par Anisimov (1968), où les équations de conservation décrivent une discontinuité. Cependant, cette approche ne tient pas compte de la dispersion temporelle et spatiale de la chaleur à l'intérieur de la paroi. Le deuxième objectif de cette thèse est donc d'implémenter ce modèle dans une optique disjoncteur, puis de le coupler à une

résolution du transfert de chaleur dans la paroi. Cette méthodologie permettra une évaluation plus précise de la quantité de gaz injectée dans la chambre de coupure ainsi que de l'usure des parois. En plus de mener à des simulations plus rigoureuses de l'efficacité des disjoncteurs, ces ajouts permettront d'en étudier l'utilisation à long terme, c'est-à-dire après plusieurs déclenchements.

Il est important de préciser qu'avant la stipulation des objectifs de cette thèse, la perspective de l'utilisation d'un logiciel commercial a été explorée. Pour plusieurs raisons pratiques, les outils nécessaires à l'étude des interactions plasma-paroi auraient pu être développés dans ce contexte. Cette option a été évalué par le biais d'une collaboration avec la société CFDRC (CFD Research Corporation 2005) de Huntsville en Alabama. Leur logiciel, CFD-ACE, permet de simuler une large gamme de phénomènes physiques, certains non disponibles sur d'autres logiciels du genre. Pour la simulation de disjoncteurs, les avantages sont nombreux : différents modèles radiatifs, possibilité de traiter des équations chimiques pour les espèces, maillages et solutions tridimensionnelles, résolution des équations de plasma et de magnéto-hydrodynamique, etc. Cependant, lors de cas-tests préliminaires, de graves problèmes pratiques ont été mis en lumière. Le plus contraignant est certainement le traitement des parties amovibles : l'utilisation de maillages chimériques ne permet pas de simuler adéquatement les problèmes de séparation d'électrodes. De plus, puisque le code n'a pas originellement été conçu dans une optique supersonique, son utilisation en ces conditions est plutôt hasardeuse. Pour ces raisons, l'utilisation des logiciels de CFDRC a été écartée. Pour ce qui est des autres codes commerciaux, par exemple FLUENT, des investigations sommaires ont été faites, sans toutefois s'y attarder autant. Bien que certains des problèmes rencontrés avec le code de CFDRC auraient possiblement pu être évités avec FLUENT, plusieurs autres ne permettaient pas de réaliser, à court terme, des simulations valides. Bref, des suites de ces constatations, il est donc mis en lumière que la façon la plus efficace d'obtenir des résultats est l'utilisation d'un code maison, comme MC^3, le code

développé et utilisé à l'École Polytechnique de Montréal depuis plus de 15 ans. Sa flexibilité, sa robustesse ainsi que sa spécificité en font encore un outil puissant pour la résolution des équations propres à ce problème, de même qu'une plate-forme stable pour le développement future. De plus, l'accessibilité au code source permet des modifications majeures et précises, sans les contraintes qu'impose un logiciel commercial.

Afin de bien saisir le contexte d'utilisation des améliorations proposées, cette thèse est divisée en trois parties. Le premier chapitre décrit brièvement les éléments du logiciel de CFD MC^3 dans lequel les nouveaux algorithmes sont implémentés, le second chapitre décrit le nouveau schéma multi-espèces développé, alors que le troisième présente le nouveau modèle d'ablation.

CHAPITRE 1

MC^3

MC^3 (Modélisation et Calcul de Coupure de Courant) est un logiciel de dynamique des fluides assistée par ordinateur (CFD) spécifique à l'analyse de la physique inhérente aux disjoncteurs, dont les éléments ont été développés au fil des ans à l'École Polytechnique de Montréal. Pour l'étude des écoulements internes, MC^3 résout les équations d'Euler sur un maillage non structuré, selon une approche volumes-finis. Les techniques de maillage utilisées permettent une adaptation en fonction de l'écoulement ou de la géométrie à simuler (Trépanier *et al.* 1993), en plus de permettre le mouvement (déplacement d'objets, de parois, etc.). MC^3 peut être utilisé de deux façons : en mode «Froid» ou en mode «Arc». Le premier mode permet d'optimiser les écoulements du gaz, en plus de calculer la tenue électrique de la chambre de coupure. Le second mode ajoute une modélisation de l'arc électrique, permettant ainsi de calculer les phénomènes physiques et les interactions qui y sont liés. Les détails des phénomènes physiques pris en considération sont décrits dans les sous-sections subséquentes.

1.1 Résoluteur

Le noyau de MC^3 est basé sur la résolution instationnaire des équations d'Euler axisymétriques :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial r\mathbf{F}_r}{\partial r} + \frac{\partial \mathbf{F}_z}{\partial z} = \mathbf{S} \tag{1.1}$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u_r \\ \rho u_z \\ \rho E \end{pmatrix} \qquad \mathbf{F_r} = \begin{pmatrix} \rho u_r \\ \rho u_r u_r + P \\ \rho u_r u_z \\ u_r(\rho E + P) \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F_z} = \begin{pmatrix} \rho u_z \\ \rho u_r u_z \\ \rho u_z u_z + P \\ u_z(\rho E + P) \end{pmatrix} \qquad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_m \\ S_{B_r} + S_{L_r} + P/r \\ S_{B_z} + S_{L_z} \\ S_{\text{ohm}} - S_{\text{rad}} + S_{\text{abl}} \end{pmatrix}$$

Ces équations sont résolues sous leur forme intégrale (forme faible) (Trépanier *et al.* 1991), selon une formulation volumes-finis. Lorsqu'intégrées sur un volume de contrôle arbitraire, elles deviennent :

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \mathbf{U}dV + \oint_{\partial V} (\mathbf{F}_r n_r + \mathbf{F}_z n_z)ds = \int_V \mathbf{S}dV$$

où $\mathbf{n} = (n_r, n_z)$ est le vecteur unitaire normal à l'interface ∂V entre l'élément de volume V et son voisin. Le vecteur conservatif $\mathbf{U}$ est projeté dans le temps selon la discrétisation explicite suivante :

$$\mathbf{U}^{t+1} = \mathbf{U}^t - \frac{\Delta t}{V}\sum_{k=1}^{N_{\text{côtés}}} \mathbf{F}_k^t L_k + \Delta t \mathbf{S}^t$$

où L_k est la longueur du côté k du volume V. Le pas de temps Δt doit respecter le critère CFL (Hirsch 1990) pour les schémas explicites.

Le vecteur de flux $\mathbf{F} = \mathbf{F}_r n_r + \mathbf{F}_z n_z$ est calculé avec le schéma de Roe (1981), en utilisant la variante de Glaister (1988) :

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_R + \mathbf{F}_L) - \frac{1}{2}\bar{\mathcal{L}}|\bar{\mathcal{D}}|\bar{\mathcal{L}}^{-1}(\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L)$$

où les indices R et L représentent les états du fluide à gauche et à droite de la frontière entre deux éléments du maillage. Les matrices $\bar{\mathcal{L}}$ et $\bar{\mathcal{D}}$ sont obtenues en diagonalisant la matrice jacobienne :

$$\mathcal{A} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}} = \mathcal{L}\mathcal{D}\mathcal{L}^{-1}$$

où $\mathcal{D}$ et $\mathcal{L}$ sont les matrices formées des valeurs propres et des vecteurs propres de $\mathcal{A}$, respectivement. Les variables de ces matrices sont par la suite remplacées par leur valeur moyenne, fonction de leur état de part et d'autre de l'interface. La méthode utilisée pour évaluer ces états détermine l'ordre du schéma ; pour un schéma du premier ordre, les valeurs sont constantes par maille, alors que pour le deuxième ordre, elles sont interpolées linéairement.

1.2 Arc électrique

On définit l'arc électrique comme une région, délimitée par deux points d'attache, ayant une très forte densité de courant. Le passage des électrons à travers l'arc est causé par une grande différence de potentiel entre les deux électrodes (points d'attache). Puisque le fluide ambiant offre une résistance à ce passage, la dissipation thermique par effet Joule est importante, de même que la radiation émanant de l'arc. Cette chaleur (température d'environ 30 000 K) cause des dissociations et des ionisations dans le fluide ambiant, le transformant ainsi en plasma.

1.2.1 Fluide d'extinction

Afin d'éteindre l'arc le plus efficacement possible, il est nécessaire que la chambre de coupure du disjoncteur contienne un excellent fluide d'extinction. Tout d'abord, afin de diminuer les chances de claquage, de même que celle d'un réamorçage après extinction, le fluide doit posséder une très bonne rigidité électrique, et ce, même lorsqu'il est ionisé. D'ailleurs, puisque le fait d'être ionisé change le comportement

d'un gaz, il est avantageux que l'énergie requise à cet effet soit la plus élevée possible. Dans la même ligne de pensée, il est aussi impératif que le fluide soit stable chimiquement afin qu'il ne réagisse pas avec les gaz d'ablation, ou qu'il n'attaque pas les parois et éléments de la chambre de coupure (non corrosif). De plus, pour permettre une réutilisation du disjoncteur, il est aussi essentiel que les transformations thermiques du gaz soient réversibles (dissociations, ionisations, recombinaisons, etc.). Finalement, le gaz doit aussi permettre une extinction optimale de l'arc ; afin d'absorber efficacement l'énergie de celle-ci, il se doit de posséder une grande chaleur spécifique, ainsi qu'une bonne conductivité thermique.

Le SF_6 répond parfaitement à tous ces critères. En plus d'être ininflammable, incolore, insipide, inodore et non toxique, il est stable chimiquement, sa molécule est parfaitement symétrique, toutes ses liaisons sont saturées et il possède une haute énergie de formation. Il est cependant à préciser que le SF_6 est maintenant considéré comme un gaz à effet de serre ; la nouvelle tendance est donc de lui trouver un remplaçant plus écologiquement acceptable (Telfer *et al.* 2004), du moins, en apparence...

1.2.2 Critère de claquage

Le critère de claquage est basé sur la théorie de l'effet cascade des électrons, qui fait en sorte qu'à un certain degré d'excitation, un électron entre en collision avec ses voisins, qui, à leur tour, entrent en collision avec d'autres électrons. Ainsi, si la densité électronique est suffisamment grande, on observe un claquage diélectrique, et l'arc électrique apparaît. Selon cette théorie, Pedersen (1970, 1989) a développé une équation qui décrit cette condition de claquage :

$$\int_0^x (\alpha - \eta)\, dx \leq K \tag{1.2}$$

où α est le coefficient d'ionisation, η le coefficient d'attachement électronique et K une constante dont la valeur est environ 18. L'intégrale se fait sur une droite entre les électrodes. Dans le cas du SF_6, il est possible de simplifier le critère de l'équation (1.2) en considérant que α et η sont des fonctions du champ électrique E et de la densité N du fluide (les valeurs de ces coefficients pour le SF_6 sont données par Morrow (1986)). Ainsi, on trouve la valeur du ratio E/N lorsque $\alpha = \eta$. En considérant que la droite d'intégration de l'équation (1.2) est très petite par rapport à la grandeur du disjoncteur, il est possible de réduire le critère de claquage à :

$$E/N > E/N(\alpha = \eta)$$

1.2.3 La buse

La buse a pour but principal de diriger le fluide d'extinction sur l'arc. Afin de rendre ce processus encore plus efficace, la plupart des buses ont une géométrie convergente-divergente, accélérant ainsi le gaz à des vitesses supersoniques. Comme la buse sert aussi à confiner l'arc, ses parois doivent être constituées d'un matériau isolant et posséder une bonne conductivité thermique. De plus, afin de permettre une utilisation prolongée du disjoncteur, ce matériau se doit d'être ininflammable, non toxique, avoir une faible réactivité chimique et une bonne résistance mécanique. En général, puisqu'il répond adéquatement à ces critères, c'est le poly-tétra-fluoro-éthylène (PTFE, connu sous le nom commercial Teflon©) qui est utilisé dans les disjoncteurs. De plus, une fois vaporisé, ses propriétés thermodynamiques s'apparentent à celle du SF_6.

Puisque dans les designs actuels, la buse se trouve à proximité de l'arc électrique, il est inévitable qu'elle soit endommagée lors de l'extinction. Il est cependant possible d'utiliser cet «effet secondaire» à bon escient. De fait, deux phénomènes issus de l'ablation ont pour conséquence de faciliter l'extinction : la présence du gaz d'ablation relativement froid qui confine l'arc, et l'augmentation de la pression

dans la chambre de coupure. Il est donc évident qu'une meilleure connaissance de l'ablation et, par le fait même, un meilleur contrôle, permet l'élaboration de disjoncteurs plus efficaces. À cet effet, il est maintenant d'usage de doper la buse de PTFE afin de mieux contrôler l'ablation. Le problème de l'utilisation d'une buse de PTFE pure vient du fait que ce matériel est relativement transparent aux radiations incidentes. L'absorption se fait donc en profondeur, générant ainsi des phénomènes s'apparentant aux explosions de phases qui déforment la paroi (voir à l'annexe I pour l'explication). De ce fait, l'accélération du gaz causée par la géométrie de la buse n'est donc plus optimale après de multiples utilisations du disjoncteur. L'ajout d'un dopant au PTFE, même en très faible quantité, permet une absorption de la radiation en surface, ce qui entraîne une ablation sans explosion de phases en profondeur. Ainsi, la paroi est ablatée de façon uniforme et prévisible, ce qui permet une meilleure utilisation à long terme de la buse, et donc du disjoncteur.

1.3 Phénomènes physiques

1.3.1 Effet Joule

L'effet Joule permet de calculer l'énergie générée par le champ électrique de l'arc. Pour calculer le champ électrique $\mathbf{E}$, on utilise la loi d'Ohm et l'équation de la continuité du courant électrique, ce qui permet de définir la densité de courant $\mathbf{J}$:

$$\begin{aligned} \mathbf{J} &= \sigma \mathbf{E} \\ \nabla \cdot \mathbf{J} &= 0 \end{aligned}$$

où σ est la conductivité électrique, définie comme une fonction de l'énergie et de la densité. On suppose ensuite que le courant électrique est défini comme le gradient

d'une fonction scalaire ϕ ; en combinant les deux équations précédentes, on obtient :

$$\nabla \cdot (\sigma \nabla \phi) = 0$$

On résout ainsi cette équation dans le plasma pour trouver $\mathbf{E}$. L'effet Joule contribue donc directement au terme source de l'équation de la conservation de l'énergie de la façon suivante :

$$S_{\text{ohm}} = \sigma |\mathbf{E}|^2$$

1.3.2 Transport radiatif

Dans MC^3, deux méthodes sont présentement utilisées pour les calculs de transport radiatif. La première est définie à l'aide des coefficients d'émission nette (en anglais, «Net Emission Coefficients» ou NEC). Cette méthode est décrite exhaustivement par Liebermann et Lowke (1976) et Zhang *et al.* (1987) ; brièvement, elle consiste à calculer l'émission de radiation faite par l'arc en tenant compte de la réabsorption faite par le gaz froid à sa frontière. Son implantation dans MC^3 est annotée dans Zhang *et al.* (1994). La seconde méthode, développée pour MC^3 par Eby et Trépanier (1998), consiste à résoudre l'équation de transfert radiatif à l'aide d'une approximation utilisant des harmoniques sphériques du premier degré (modèle P-1). Contrairement à la méthode précédente, celle-ci permet de tenir compte de la géométrie de l'arc. Ainsi, l'équation de transfert radiatif dans un milieu qui émet, absorbe et dissipe, est :

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_\lambda = \kappa_\lambda I_{b\lambda} - (\kappa_\lambda + \sigma_{s\lambda}) I_\lambda + \frac{\sigma_{s\lambda}}{4\pi} \int_{4\pi} I_\lambda(\hat{\mathbf{s}}_i) \mathbf{\Phi}_\lambda(\hat{\mathbf{s}}_i, \hat{\mathbf{s}}) d\Omega_i \qquad (1.3)$$

où I_λ est l'intensité radiative spectrale dans la direction $\mathbf{s}$, κ_λ le coefficient d'absorption, $\sigma_{s\lambda}$ le coefficient de dissipation, $I_{b\lambda}$ l'intensité spectrale du rayonnement d'un corps noir, $\mathbf{\Phi}_\lambda$ la fonction de phase de dispersion spectrale et Ω_i l'angle solide.

Dans le cas d'un disjoncteur, il est superflu de tenir compte du terme de dissipation et d'émission des parois. En remplacant l'intensité radiative par des harmoniques sphériques, l'équation (1.3), une fois intégrée sur l'angle solide, devient :

$$\nabla G_\lambda = -3\kappa_\lambda \mathbf{q}_\lambda$$
$$\nabla \cdot \mathbf{q}_\lambda = -\kappa_\lambda (G_\lambda - 4\pi I_{b\lambda})$$

où $\mathbf{q}$ est le flux de chaleur, κ est le coefficient d'absorption radiatif, I_b est la radiation d'un corps noir et G_l est le rayonnement incident. La combinaison de ces deux expressions donnent l'équation suivante :

$$\nabla \cdot \left(\frac{1}{\kappa_\lambda} \nabla G_\lambda \right) = 3\kappa_\lambda (G_\lambda - 4\pi I_{b\lambda})$$

La condition frontière de cette équation différentielle est un des facteurs les plus importants de l'exactitude du modèle P-1. Dans MC^3, les deux conditions suivantes sont utilisées :

- Condition de type Dirichelt : $G|_{paroi} = 0$
- Condition de type Marshak : $\frac{1}{\kappa} \nabla G \cdot \mathbf{n} = -\frac{3}{2} \frac{\epsilon_w}{2-\epsilon_w} G$

où ϵ_w est l'émissivité du mur, généralement considérée comme égale à 1. Pour des raisons pratiques et simplificatrices, les coefficients radiatifs sont moyennés sur des bandes l (cinq ou douze, en fonction des gaz). L'équation (1.3.2) peut être numériquement résolue avec une approche volumes-finis ; il suffit d'intégrer sur un volume de contrôle, ce qui donne :

$$\oint_{\partial V} \nabla G_l \cdot \mathbf{ds} = \int_V 3\kappa_l (G_l - 4\pi I_{bl}) dV$$

Une fois les valeurs de G_l obtenues, il est possible de calculer le terme source radiatif qui s'ajoute directement à l'équation de conservation de l'énergie :

$$S_{\text{rad}} = -\nabla \cdot \mathbf{q} = -\sum_{l=1}^{N_{\text{bandes}}} \kappa_l (4\pi I_{b_l} - G_l)$$

1.3.3 Forces de Lorentz

Les forces de Lorentz permettent de calculer le champ magnétique auto-induit $\mathbf{H}$. La composante radiale de ces forces a un effet important sur l'arc, le compressant par striction longitudinale («Z-Pinch effect»). Pour calculer les forces de Lorentz, les équations de Maxwell sont utilisées. Pour un courant alternatif sinusoïdal, comme celui utilisé dans les disjoncteurs, les termes transitoires de ces équations sont négligeables. On peut ainsi les réduire à :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0 \\ \nabla \cdot \mathbf{J} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{E} &= 0 \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \mathbf{J} \end{aligned} \tag{1.4}$$

où $\mathbf{B}$ représente la densité du flux magnétique. En prenant le rotationnel de la dernière équation, on obtient :

$$\nabla(\nabla \cdot \mathbf{H}) - \nabla^2 \mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{J}$$

Puisque $\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H}$, on peut éliminer le premier terme de gauche en y insérant la première équation de Maxwell. On obtient finalement :

$$-\nabla^2 \mathbf{H} = \nabla \times \mathbf{J}$$

Pour obtenir la solution du champ magnétique, on intègre sur un volume de contrôle en supposant que la seule composante non négligeable est dans la direction azimutale (θ) :

$$\oint_{\partial V} \nabla H_\theta \cdot \mathbf{ds} + \int_V \frac{H_\theta}{r^2} dV = \oint_{\partial V} (\sigma \mathbf{E} \times \hat{\mathbf{s}}_\theta) \cdot \mathbf{ds} + \int_V \frac{1}{r} \sigma \mathbf{E} \cdot \hat{\mathbf{s}}_z dV$$

En utilisant la relation $B_\theta = \mu_0 H_\theta$, on obtient directement les termes sources ajoutés aux équations de la conservation de la quantité de mouvement :

$$\begin{aligned} S_{B_z} &= J_r B_\theta \\ S_{B_r} &= -J_z B_\theta \end{aligned}$$

1.4 Équation d'état et gaz réel

Lorsque des gaz à basse température se transforment en plasma à haute température, comme c'est le cas dans les disjoncteurs (voir Godin *et al.* (2000)), l'équation des gaz parfaits ne peut pas être appliquée directement. Pour ce type de phénomènes, la composition du gaz change dramatiquement (processus causé par des dissociations, recombinaisons, ionisations, etc.) et les propriétés thermodynamiques qui tiennent compte de ces changements doivent être utilisées. Dans cette optique, une méthode numérique efficace pour trouver la composition chimique et les propriétés d'un gaz à une température et à une densité données a été développée par Godin et Trépanier (1999).

Dans un contexte de simulation, il est impensable de lier dynamiquement le calcul thermodynamique à la résolution des équations générales. Ainsi, les variables P et T sont au préalablement tabulées en fonctions de ρ, e et de la composition. Il suffit donc, pour obtenir les valeurs requises, d'interpoler dans les tables. Avec cette formulation, le gaz est donc considéré parfait, localement, et obéit à une loi du type $P = \kappa \rho e = \rho R T$, où κ et R ne sont pas constants. Pour trouver

les dérivées partielles de la pression, il est nécessaire d'évaluer la variation de la pression, toujours dans les tables thermodynamiques. Il suffit donc d'appliquer :

$$\begin{aligned} P_e &= \kappa\rho + \frac{\partial\kappa}{\partial e}\rho e \\ P_\rho &= \kappa e + \frac{\partial\kappa}{\partial\rho}\rho e \end{aligned}$$

où les dérivées partielles de κ sont évaluées dans les tables. Les figures (1.1) à (1.4) démontrent la dépendance de R, P, P_e et P_ρ. Tel que prévu par l'approximation des gaz parfaits, R est à peu près constant pour des températures entre 300 K and 5000 K. Par contre, pour des températures plus élevées, on peut observer des variations de plus de 500%.

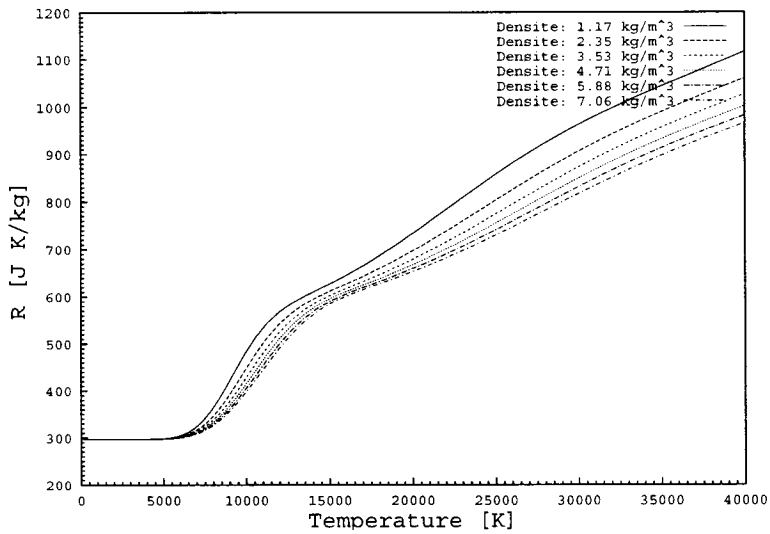


FIG. 1.1 *R en fonction de la température et de la densité pour N_2*

1.5 Ablation

L'ablation est un phénomène très important dans l'élaboration d'un modèle physique de disjoncteur. En plus d'être inévitable lorsque l'arc électrique apparaît

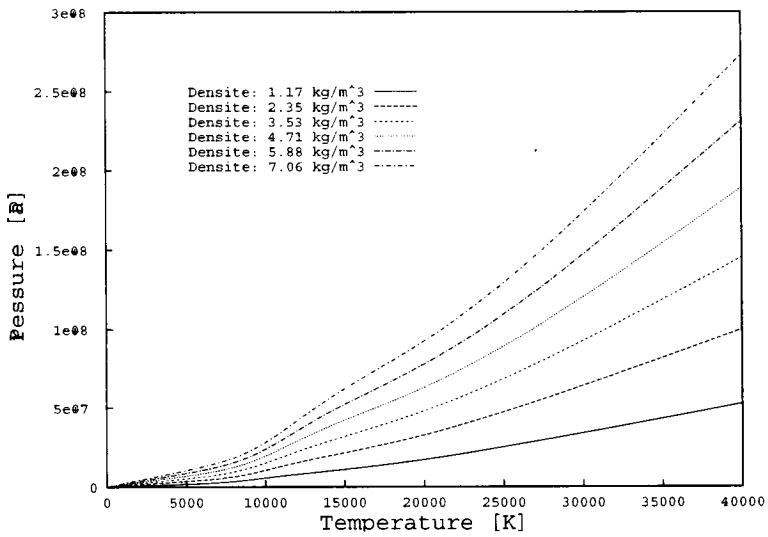


FIG. 1.2 *Pression en fonction de la température et de la densité pour* N_2

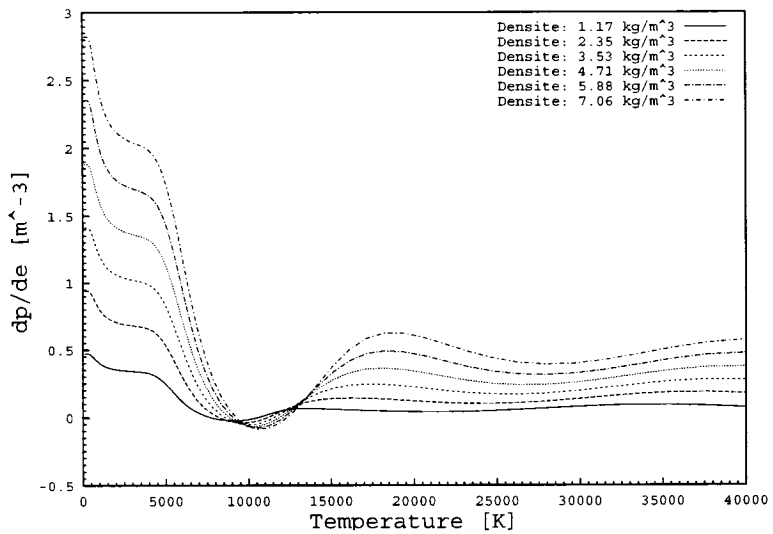


FIG. 1.3 $\frac{\partial P}{\partial e}$ *en fonction de la température et de la densité pour* N_2

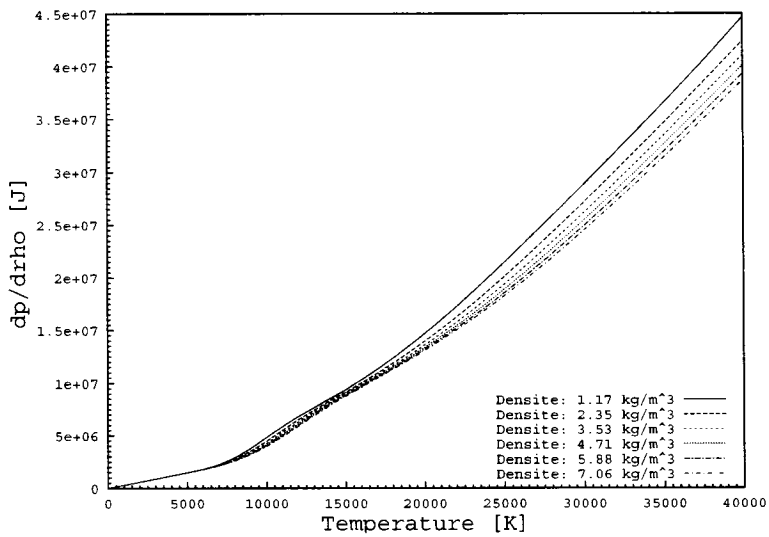


FIG. 1.4 $\frac{\partial P}{\partial \rho}$ *en fonction de la température et de la densité pour* N_2

et que le gaz environnant chauffe, elle est même désormais souhaitable. Puisque le gaz projeté augmente la pression dans la chambre, l'extinction de l'arc est plus efficace lors du passage du courant alternatif au point zéro, ce qui réduit le niveau d'énergie mécanique nécessaire.

Le modèle présentement utilisé dans MC^3 est une simplification du problème obtenue en négligeant les phénomènes transitoires. On fait aussi l'hypothèse que, dans le cas d'un matériel d'ablation non métallique, l'ablation dépend exclusivement de la radiation incidente. Malgré le fait que la conduction est évidemment présente, elle est négligeable devant le fort taux de radiation. Les deux mécanismes responsables de l'ablation selon les hypothèses sus-mentionnées sont la pyrolyse et la photodégradation.

La pyrolyse est caractérisée par un échauffement causé par l'absorption de la radiation à basse énergie. Cet échauffement permet aux liens chimiques qui maintiennent le PTFE dans son état solide de se briser, ce qui a pour effet de produire du C_2F_4 à une température tout près du point de liquéfaction, c'est-à-dire environ 1000

K. Puisque ce composé est instable, une réaction exothermique s'en suit, générant du CF_4 et de la fumée de graphite en proportions égales et à une température de 2500 K. Cette dernière fait en sorte que la mince couche de matière ablatée accroît énormément son coefficient d'absorption de radiation. Aussi, puisque la température augmente, des composés tels que le CF_2, CF, C et F apparaissent. À des températures avoisinant 3500 K, la vapeur du PTFE devient totalement transparente, puisque les particules de carbone en suspension sont vaporisées. La couche de matière ablatée est donc considérée à l'équilibre à cette température. Des suites d'observations expérimentales, Ruchti et Niemeyer (1986) ont déterminé que la pyrolise était négligeable pour le PTFE.

Pour ce qui est de la photodégradation, la réaction étant beaucoup plus violente, les liens de carbone du PTFE sont directement brisés par réactions photochimiques. Ainsi, des radicaux CF_2^* sont libérés dans la couche, et entrent en collisions. À la suite de ces dernières, les radicaux atteignent l'équilibre thermodynamique à une température avoisinant les 3500 K. Il est à noter que la photodégradation n'a lieu que pour une radiation dont la longueur d'onde est plus petite à 200 nm, puisqu'une énergie de 4.2 eV est nécessaire pour briser les liens de carbone du PTFE.

Sur la figure (1.5), tirée de Godin *et al.* (2000), les phénomènes décrits précédemment sont illustrés quantitativement. En posant quelques simplifications de base, il est possible de développer un modèle analytique théorique qui tient compte des phénomènes thermiques de la paroi et de l'énergie radiative incidente. On suppose tout d'abord que l'énergie incidente est connue, et qu'elle est entièrement absorbée à la surface de la paroi ; dans la réalité, une partie de cette énergie pénètre la paroi, et est absorbée en profondeur. Ainsi, sous l'effet de la radiation, la paroi est tout d'abord chauffée, puis elle fond et elle est finalement vaporisée. Dans le cas où les échanges thermiques sont plus extrêmes, tels que ceux décrits plus haut, on ne parle pas de vaporisation, mais d'ablation. En décrivant correctement la relation entre la paroi et le milieu ambiant, il est donc possible de connaître la position de

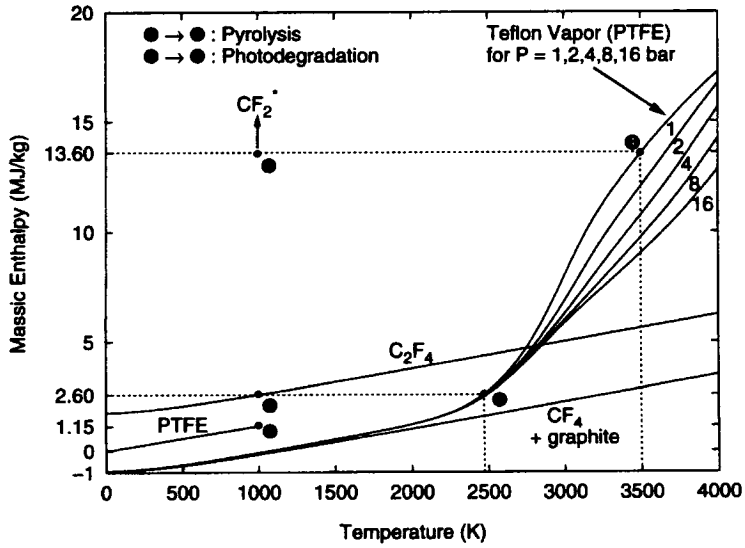


FIG. 1.5 *Diagramme des enthalpies du PTFE (figure tirée de Godin et al. (2000))*

ce front d'ablation, de même que sa vitesse. Dans le cas des disjoncteurs, l'énergie incidente est d'une valeur suffisamment grande pour qu'on puisse négliger les effets transitoires, c'est-à-dire la période requise pour chauffer et fondre la paroi. En résolvant l'équation de distribution de la température dans la paroi dans ces conditions (le calcul complet est présenté à l'annexe III), on obtient l'expression du débit massique de matière ablatée :

$$\dot{m} = \frac{Q_{\text{rad}}\rho_s}{h_v + \delta h_a} \tag{1.5}$$

où h_v est l'enthalpie requise pour vaporiser le PTFE solide, et δh_a est l'énergie à ajouter au gaz pour le chauffer à sa température d'ablation, environ 3500K.

Puisqu'en considérant l'ablation, de la masse est ajoutée au système, les termes sources de toutes les équations de conservation doivent en tenir compte. Tel que démontré dans les chapitres précédents, une approche volumes-finis est utilisée dans MC^3, ce qui fait en sorte que le terme source des équations de conservation de la

masse est calculé ainsi :

$$S_m = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{\text{côtés}} \dot{m}_k S_k$$

où V représente le volume engendré par la rotation de la maille autour de l'axe axisymétrique, et S_k représente la surface engendrée par le côté k de la maille. De la même façon, on peut calculer le terme source des équations de la quantité de mouvement. Puisqu'on considère que la vapeur est émise selon l'axe normal à la surface, on en déduit que :

$$\begin{aligned} v_n &= U \frac{\rho_s}{\rho_g} \\ v_t &= 0 \end{aligned}$$

où ρ_g est la densité du gaz d'ablation à sa condition thermodynamique d'injection. Les vitesses radiales et longitudinales peuvent donc être définies ainsi :

$$\begin{aligned} v_r &= v_n n_r + v_t t_r \\ v_z &= v_n n_z + v_t t_z \end{aligned}$$

Ainsi, les contributions de l'ablation aux termes sources des équations de la conservation de la quantité de mouvement sont :

$$S_{L_r} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{N_{\text{côtés}}} v_{rk} \dot{m}_k L_k$$
$$S_{L_z} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{N_{\text{côtés}}} v_{zk} \dot{m}_k L_k$$

Quant à la contribution au terme source de l'énergie, elle se fait de la façon suivante :

$$S_{\text{abl}} = \frac{1}{V} \sum_{k=1}^{N_{\text{sides}}} \left(e_{3500} + \frac{v_{rk}^2 + v_{zk}^2}{2} \right) \dot{m}_k L_k \tag{1.6}$$

ce qui tient compte de l'énergie cinétique du gaz émit et de l'énergie requise pour chauffer le gaz ablaté à sa température d'injection.

1.5.1 L'influence des vapeurs métalliques

La contamination du gaz présent dans la chambre par la matière ablatée a d'évidentes répercussions sur le comportement de l'arc électrique. Le rôle de l'ablation de la buse ayant été défini, il est nécessaire de discuter de celui des électrodes. Puisque celles-ci ont pour fonction de transmettre le courant, la conductivité du matériau métallique utilisé est élevée. Il est donc évident que les vapeurs métalliques auront une forte incidence sur le comportement de l'arc au niveau chimique, alors que les vapeurs de PTFE ne l'affecteront que thermodynamiquement. Ces conclusions ont d'ailleurs été démontrées exhaustivement et quantitativement par Paul *et al.* (1997). Mais, aussi contradictoire que cela puisse paraître, dans la simulation de disjoncteur, on néglige présentement ce phénomène. La raison d'une telle démarche est bien simple ; puisque les ingénieurs sont conscients depuis fort longtemps des problèmes potentiels causés par les vapeurs métalliques, les disjoncteurs sont conçus de telle sorte que ces vapeurs sont immédiatement évacuées vers des régions «froides» de la chambre du disjoncteur, loin des zones d'expansion de l'arc. Par contre, tel que discuté à la section 1.5, les vapeurs de PTFE jouent un rôle majeur dans la propagation et le confinement de l'arc, et doivent donc être considérées. Il est cependant à noter que de récents développements au logiciel MC^3 permettent de définir la distribution de température dans les électrodes (Maruzewski *et al.* 2002) ; la prochaine étape de ces travaux pourrait donc être la modélisation de l'ablation des électrodes, et ainsi permettre de garder la trace de ces vapeurs.

CHAPITRE 2

RÉSOLUTEUR MULTI-ESPÈCES

2.1 Modèle unidimensionnel

Afin de permettre au logiciel MC^3 de traiter les écoulements multi-espèces, il est nécessaire, tout d'abord, de bien définir la méthodologie. Ainsi, dans un but exploratoire, le cheminement de développement est fait pour un écoulement à une seule dimension (Martin *et al.* 2001, 2002).

2.1.1 Équations de base

Le système d'équations décrivant un écoulement multi-espèces unidimensionnel peut être exprimé ainsi :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial x} = 0 \tag{2.1}$$

avec :

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \cdots \\ \rho_n \\ \rho u \\ \rho E \end{pmatrix} ; \quad \mathbf{F} = \begin{pmatrix} \rho_1 u \\ \rho_2 u \\ \cdots \\ \rho_n u \\ \rho u u + P \\ u\left(\rho E + P\right) \end{pmatrix}$$

où l'indice n indique le nombre d'espèces et $E = e + \frac{1}{2}u^2$ est l'énergie totale. Il est important de noter que l'approche multi-espèces utilisée considère la densité totale comme la somme des densités partielles (i.e. de chaque espèce n). Cette hypothèse s'énonce ainsi :

$$\rho = \sum_{i=1}^{n} \rho_i \tag{2.2}$$

La présente formulation, c'est-à-dire l'utilisation des densités partielles comme variables principales, a pour avantage d'éliminer les soustractions dans les équations de conservation de la masse, supprimant ainsi la possibilité que des densités partielles négatives soient causées par le calcul numérique. La pression, quant à elle, est évaluée à partir des variables du problème, à l'aide d'une équation d'état de la forme :

$$P = P(\rho_1, \rho_2, \ldots, \rho_n, e) \tag{2.3}$$

Tel que mentionné à la section 1, les équations sont ensuite intégrées sur un volume (dans ce cas-ci, unidimensionnel), selon une formulation volumes-finis (Trépanier *et al.* 1991) :

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \mathbf{U} dV + \oint_{\partial V} \mathbf{F} ds = 0$$

où ∂V est l'interface entre l'élément de volume V et ses voisins. Le vecteur $\mathbf{U}$ est avancé au temps $t+1$ selon :

$$\mathbf{U}_j^{t+1} = \mathbf{U}_j^t - \frac{\Delta t}{\Delta x}(\mathbf{F}_{j+1/2}^t - \mathbf{F}_{j-1/2}^t)$$

La façon dont est calculée $\mathbf{F}$ à l'interface entre deux cellules est ce qui détermine la nature du schéma employé, de même que la précision de celui-ci.

2.1.2 La méthode de Roe

Tel qu'indiqué au chapitre 1, la méthode utilisée pour évaluer le vecteur flux $\mathbf{F}$ est celle développée par Roe (1981) puis généralisée par Glaister (1988) pour les gaz réels. Elle consiste à introduire une matrice moyenne $\bar{\mathcal{A}}$ approximant la matrice jacobienne issue de la linéarisation du système d'équations d'Euler (2.1). Selon cette formulation, on écrit d'abord l'équation (2.1) sous sa forme quasi-linéaire :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathcal{A}\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial x} = 0$$

où $\mathcal{A} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}}$ est la matrice jacobienne. Ensuite, on cherche à déterminer une matrice moyenne $\bar{\mathcal{A}}$ fonction des états à gauche (u_L) et à droite (u_R) de l'interface entre deux cellules de calcul. Afin que l'algorithme soit conservatif, et qu'en plus, il perçoive les chocs, il est primordial que la matrice respecte certaines conditions énoncées par Roe (1981) :

- $\mathbf{F} = \bar{\mathcal{A}}\mathbf{U}$
- si $u_R \rightarrow u_L$, alors $\bar{\mathcal{A}} \rightarrow \mathcal{A}$
- $\Delta\mathbf{F} = \bar{\mathcal{A}}\Delta\mathbf{U}$
- Les vecteurs propres de $\bar{\mathcal{A}}$ doivent être linéairement indépendants

Les valeurs moyennes de $\bar{\mathcal{A}}$ sont obtenues en décomposant la matrice selon ses vecteurs propres et ses valeurs propres :

$$\bar{\mathcal{A}} = \bar{\mathcal{L}}\bar{\mathcal{D}}\bar{\mathcal{L}}^{-1}$$

Une fois ces matrices calculées, le flux à l'interface est tout simplement évalué par la formule suivante, qui représente un décentrage en amont selon les directions caractéristiques :

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_L + \mathbf{F}_R) - \frac{1}{2}\bar{\mathcal{L}}|\bar{\mathcal{D}}|\bar{\mathcal{L}}^{-1}\Delta\mathbf{U}$$

2.1.3 Matrice jacobienne

Pour obtenir la matrice jacobienne $\mathcal{A}$, il est plus simple d'exprimer les deux vecteurs, $\mathbf{F}$ et $\mathbf{U}$, en fonction d'un vecteur paramètre $\mathbf{W}$. Afin de rester fidèle à la démarche de Roe, un vecteur défini en fonction de la racine carrée de la densité est

choisi :

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \\ \cdots \\ W_n \\ W_{(n+1)} \\ W_{(n+2)} \end{pmatrix} = \sqrt{\rho} \begin{pmatrix} \sqrt{y_1} \\ \sqrt{y_2} \\ \cdots \\ \sqrt{y_n} \\ u \\ E \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{U}(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} W_1^2 \\ W_2^2 \\ \cdots \\ W_n^2 \\ W_{(n+1)} \left(\sum_{i=1}^n W_i^2\right)^{1/2} \\ W_{(n+2)} \left(\sum_{i=1}^n W_i^2\right)^{1/2} \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F}(\mathbf{W}) = \begin{pmatrix} \frac{W_1^2 W_{(n+1)}}{(\sum_{i=1}^n W_i^2)^{1/2}} \\ \frac{W_2^2 W_{(n+1)}}{(\sum_{i=1}^n W_i^2)^{1/2}} \\ \cdots \\ \frac{W_n^2 W_{(n+1)}}{(\sum_{i=1}^n W_i^2)^{1/2}} \\ W_{(n+1)}^2 + P \\ W_{(n+1)} W_{(n+2)} + \frac{W_{(n+2)}}{(\sum_{i=1}^n W_i^2)^{1/2}} P \end{pmatrix}$$

où $y_i = \rho_i / \rho$.

Avec cette formulation, il est simple d'évaluer la dérivée de $\mathbf{F}$ par rapport à $\mathbf{W}$, ce qui permet de construire aisément la matrice jacobienne $\mathcal{A}(\mathbf{W})$. Les seules quantités qui ne peuvent être exprimées explicitement sont la pression et ses dérivées, pour la raison évidente qu'une équation d'état n'est pas encore définie.

2.1.4 Dérivées de la pression

Tel qu'il a été indiqué au préalable, la pression est définie par une relation du type $P = P(\rho_1, \rho_2, \ldots, \rho_n, e)$. Cependant, pour alléger la notation mathématique, il est préférable de la définir plutôt par $P = P(\rho, e)$, où $\rho = \rho(\rho_1, \rho_2, \ldots, \rho_n)$. Avec cette approche, on peut donc définir e et ρ en fonction du vecteur $\mathbf{W}$:

$$\rho = \sum_{i=1}^{n} W_i^2$$

$$e = E - \frac{u^2}{2} = \frac{W_{n+2}}{(\sum_{i=1}^{n} W_i^2)^{1/2}} - \frac{W_{n+1}^2}{2\,(\sum_{i=1}^{n} W_i^2)}$$

Ainsi, les dérivées partielles de la pression par rapport à W_j sont données par la règle de la dérivation en chaîne :

$$\frac{\partial P}{\partial W_j} = \frac{\partial P}{\partial e}\frac{\partial e}{\partial W_j} + \frac{\partial P}{\partial \rho}\frac{\partial \rho}{\partial W_j} \tag{2.4}$$

Explicitement, ces termes sont donc :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial W_j} &= 2\sqrt{\rho_j} \qquad j = 1, n \\ \frac{\partial \rho}{\partial W_{(n+1)}} &= 0 \\ \frac{\partial \rho}{\partial W_{(n+2)}} &= 0 \end{aligned}$$

et :

$$\begin{aligned} \frac{\partial e}{\partial W_j} &= \frac{\sqrt{\rho_j}}{\rho}(u^2 - E) \qquad j = 1, n \\ \frac{\partial e}{\partial W_{(n+1)}} &= -\frac{u}{\sqrt{\rho}} \\ \frac{\partial e}{\partial W_{(n+2)}} &= \frac{1}{\sqrt{\rho}} \end{aligned}$$

Avec ces résultats, l'équation (2.4) devient :

$$\frac{\partial P}{\partial W_j} = \sqrt{\rho_j}\left[\frac{P_e}{\rho}(u^2 - H - \frac{P}{\rho}) + 2c^2\right] \qquad j = 1, n \tag{2.5}$$

$$\frac{\partial P}{\partial W_{(n+1)}} = -\frac{u}{\sqrt{\rho}}P_e \tag{2.6}$$

$$\frac{\partial P}{\partial W_{(n+2)}} = \frac{P_e}{\sqrt{\rho}} \tag{2.7}$$

avec $P_e = \dfrac{\partial P}{\partial e}$. Il est à noter que cette méthodologie simplificatrice sur la règle de dérivation en chaîne ne constitue en rien une perte de généralité puisque la relation $\rho = \sum_{j=1}^{n} \rho_j$ avait auparavant été définie et fait ainsi partie intégrante du développement.

2.1.5 La matrice jacobienne

En utilisant les expressions obtenues précédemment, la matrice jacobienne peut être construite en utilisant $\mathcal{A} = \mathcal{C}\mathcal{B}^{-1}$, où :

$$\mathcal{B} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{W}}$$
$$\mathcal{C} = \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{W}}$$

$$\mathcal{A} = \begin{bmatrix} u(1-\rho_1/\rho) & -u\rho_1/\rho & \dots & -u\rho_1/\rho & \rho_1/\rho & 0 \\ -u\rho_2/\rho & u(1-\rho_2/\rho) & \dots & -u\rho_2/\rho & \rho_2/\rho & 0 \\ \dots & \dots & \ddots & \dots & \dots & \dots \\ -u\rho_n/\rho & -u\rho_n/\rho & \dots & u(1-\rho_n/\rho) & \rho_n/\rho & 0 \\ \psi & \psi & \dots & \psi & 2u - \frac{u}{\rho}P_e & \frac{P_e}{\rho} \\ \phi & \phi & \dots & \phi & H - \frac{u^2}{\rho}P_e & u(1+\frac{P_e}{\rho}) \end{bmatrix} \tag{2.8}$$

où :

$$\psi = c^2 - u^2 + \frac{P_e}{\rho}(u^2 - H).$$

$$\phi = u\left[(c^2 - H) + \frac{P_e}{\rho}(u^2 - H)\right]$$

et

$$H = e + \frac{P}{\rho} + \frac{u^2}{2} = E + \frac{P}{\rho}$$

2.1.6 Valeurs et vecteurs propres

Les valeurs propres de la matrice jacobienne sont calculées selon la formule habituelle : $|\mathcal{A} - \lambda_i \mathcal{I}| = 0$. Elles sont donc :

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= u - c \\ \lambda_i &= u \qquad i = 2, n+1 \\ \lambda_{(n+2)} &= u + c \end{aligned}$$

On utilise la relation $(\mathcal{A} - \lambda_i \mathcal{I})\mathbf{e}_i = 0$ pour déterminer les vecteurs propres. Le fait qu'il y ait une dégénérescence des valeurs propres, causée entre autres par la similitude des équations de conservation des densités partielles, génère un système d'équations sous-défini. Il est donc primordial de choisir les vecteurs propres consciencieusement, afin d'éliminer, entre autres, des divisions potentielles par zéro. Aussi, dans un souci d'esthétisme mathématique, de même que dans l'optique d'une généralisation, il est important de définir les vecteurs propres associés aux valeurs propres dégénérées d'une façon analogue. La matrice $\mathcal{L}$, formée des vecteurs propres

$\mathbf{e}_i$, est ainsi obtenue :

$$\mathcal{L} = \begin{bmatrix} \frac{\rho_1}{\rho} & 1 & 0 & \dots & 0 & \frac{\rho_1}{\rho} \\ \frac{\rho_2}{\rho} & 0 & 1 & \dots & 0 & \frac{\rho_2}{\rho} \\ \dots & \dots & \dots & \ddots & \dots & \dots \\ \frac{\rho_n}{\rho} & 0 & 0 & \dots & 1 & \frac{\rho_n}{\rho} \\ u-c & u & u & \cdots & u & u+c \\ H-uc & H-\frac{c^2\rho}{P_\epsilon} & H-\frac{c^2\rho}{P_\epsilon} & \cdots & H-\frac{c^2\rho}{P_\epsilon} & H+uc \end{bmatrix} \tag{2.9}$$

Comme on le voit dans cette matrice, les colonnes centrales sont définies de façon simple, facilement généralisable. Il est important de souligner qu'en posant le nombre d'espèces à un ($n = 1$), les matrices $\mathcal{A}$ et $\mathcal{S}$ sont exactement les mêmes que celles décrites par Glaister (1988). Avec la matrice $\mathcal{L}$ définie explicitement, la matrice jacobienne peut maintenant être construite avec $\mathcal{A} = \mathcal{L}\mathcal{D}\mathcal{L}^{-1}$, où $\mathcal{D} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{n+2})$ est la matrice diagonale des valeurs propres.

Afin de respecter les propriétés susmentionnées, des valeurs moyennes pour chaque variable doivent être définies, en fonction de leurs valeurs de chaque côté d'une interface donnée. Ces valeurs moyennes sont trouvées en résolvant une des équations suivantes.

$$\Delta\mathbf{U} = \sum_{j=1}^{N+2} \bar{\alpha}_j \bar{\mathbf{e}}_j \tag{2.10}$$

$$\Delta\mathbf{F} = \sum_{j=1}^{N+2} \bar{\lambda}_j \bar{\alpha}_j \bar{\mathbf{e}}_j \tag{2.11}$$

où $\Delta\cdot = (\cdot)_R - (\cdot)_L$ Après quelques fastidieuses manipulations algébriques (coir

Glaister (1988) pour les détails), on obtient :

$$\begin{aligned}
\bar{\alpha}_1 &= \frac{1}{2\bar{c}^2}(\Delta P + \bar{\rho}\bar{c}\Delta u) \\
\bar{\alpha}_i &= \Delta\rho_{(i-1)} - y_{(i-1)}\frac{\Delta P}{\bar{c}^2} \qquad i = 2, 3, \ldots, N+1 \\
\bar{\alpha}_{N+2} &= \frac{1}{2\bar{c}^2}(\Delta P - \bar{\rho}\bar{c}\Delta u)
\end{aligned}$$

Une fois ces valeurs obtenues, il est maintenant possible de définir les valeurs moyennes pour qu'elles satisfassent les équations (2.10) et (2.11). On obtient donc, en utilisant des relations du type $\Delta(ab) = \bar{a}\Delta b + \bar{b}\Delta a$:

$$\begin{aligned}
\bar{\rho} &= \sqrt{\rho_L}\sqrt{\rho_R} \\
\bar{u} &= \frac{u_L\sqrt{\rho_L} + u_R\sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}} \\
\bar{H} &= \frac{H_L\sqrt{\rho_L} + H_R\sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}
\end{aligned}$$

La solution des équations (2.10) et (2.11) ne donne pas de solution unique pour la définition de la valeur moyenne de la densité de chaque espèce. La seule condition à respecter est $\sum_{i=1}^{n}\bar{\rho}_i = \bar{\rho} = \sqrt{\rho_L\rho_R}$. Ainsi, une expression arbitraire peut être utilisée, pour autant que cette condition soit satisfaite. Toute simple, l'équation suivante est utilisée :

$$\bar{\rho}_i = \frac{(\rho_{Li} + \rho_{Ri})\sqrt{\rho_L\rho_R}}{\sum_{j=1}^{n}(\rho_{Lj} + \rho_{Rj})}$$

Les quantités moyennes des variables «secondaires», c'est-à-dire celles qui n'appa-

raissent pas dans **U**, peuvent être obtenues de la même façon :

$$\bar{e} = \frac{e_L\sqrt{\rho_L} + e_R\sqrt{\rho_R}}{\sqrt{\rho_L} + \sqrt{\rho_R}}$$
$$\bar{p} = \bar{\rho}\left(\bar{H} - \bar{e} - \frac{1}{2}\bar{u}^2\right)$$
$$\bar{c} = \sqrt{\bar{P}_e\frac{\bar{P}}{\bar{\rho}^2} + \bar{P}_\rho}$$

Un problème plus complexe se pose pour ce qui est des dérivées partielles de la pression $\bar{P}_e$ and $\bar{P}_\rho$. Les troisième et quatrième propriétés définies par Roe et énumérées à la section 1 doivent être respectés pour que la matrice $\bar{A}$ soit correctement posée. Ainsi, il faut que :

$$\Delta P = \bar{P}_e\Delta e + \bar{P}_\rho\Delta\rho \tag{2.12}$$

$$\text{si } u_R \to u_L, \text{ alors } \bar{P}_e \to P_e \text{ et } \bar{P}_\rho \to P_\rho \tag{2.13}$$

Dans la formulation actuelle, aucune équation explicite n'est définie. La solution suivante, proposée par Glaister, est donc acceptable puisqu'elle satisfait théoriquement les deux conditions précédentes :

$$\bar{P}_e = \begin{cases} \frac{P(\rho_{iR},e_R)+P(\rho_{iL},e_R)-P(\rho_{iR},e_L)-P(\rho_{iL},e_L)}{2\Delta e} & \text{si } |e_R - e_L| \geq \epsilon \\ \frac{P_e(\rho_{iR},e)+P_e(\rho_{iL},e)}{2} & \text{sinon} \end{cases} \tag{2.14}$$

$$\bar{P}_\rho = \begin{cases} \frac{P(\rho_{iR},e_R)+P(\rho_{iR},e_L)-P(\rho_{iL},e_R)-P(\rho_{iL},e_L)}{2\Delta\rho} & \text{si } |\rho_R - \rho_L| \geq \epsilon \\ \frac{P_\rho(\rho,e_R)+P_e(\rho,e_L)}{2} & \text{sinon} \end{cases} \tag{2.15}$$

où ρ_i indique une dépendance en ρ_1, ρ_2, ..., ρ_n alors que la valeur de ϵ est définie en fonction de la précision de la machine utilisée pour le calcul. On voit donc que toutes les combinaisons de (2.14) et (2.15) respectent les conditions, en théorie. Cependant, avec l'algorithme utilisé dans le code, cette approche est des plus inef-

ficace puisque pas moins de quatre interpolations dans les tables thermodynamiques doivent être effectuées. De plus, ce type de formulation génère de sérieux problèmes de robustesse puisque ϵ doit tendre vers zéro afin de respecter le mieux possible la deuxième propriété ; or, pour que le code demeure stable, il est impensable de trop réduire la valeur de ϵ. Pour cette raison et aussi pour optimiser l'algorithme, ce sont plutôt les définitions suivantes qui sont employées :

$$\bar{P}_e = P_e(\bar{\rho}_1, \bar{\rho}_2, ..., \bar{\rho}_n, \bar{e})$$
$$\bar{P}_\rho = P_\rho(\bar{\rho}_1, \bar{\rho}_2, ..., \bar{\rho}_n, \bar{e})$$

Même si l'équation (2.13) est satisfaite, la condition de l'équation (2.12) ne l'est pas nécessairement ; tout dépend du type d'interpolation qui est réalisée à partir des valeurs dans les tables. La technique utilisée dans le présent code, celle développée par Godin et Trépanier (1999), ne satisfait pas la condition, bien qu'elle s'en approche. L'approximation générée par cette simplification ne vient par contre pas influencer les capacités du code à modéliser les chocs, comme on peut le voir à la section des résultats 2.1.9. Il est à noter que le présent développement permet aussi l'utilisation éventuelle des solutions au problèmes des dérivées de la pression proposée par Larrouturou (1990) et Mehlman (1991).

2.1.7 Gaz parfait

À des fins de vérification et de validation, un développement pour gaz parfait est ici détaillé. L'équation d'état (2.3) devient alors

$$P = \kappa \rho e$$

En utilisant cette définition, on peut évaluer explicitement les quantités manquantes de la matrice (2.9) en fonction des propriétés thermodynamiques de chacun

des gaz (dans le développement présent, on utilise ρ_i, T, κ_i et c_{vi} comme variables thermodynamiques). En plus de considérer que la densité totale est la somme des densités partielles, on considère que la pression obéit à la même relation (loi de Dalton), et donc que $P = \sum_{i=1}^{n} P_i$. En posant $y_i = \rho_i/\rho$, on définit aussi les quantités suivantes :

$$\begin{aligned} e_i &= c_{v_i} T && \text{Relation énergie-température} \\ c_v &= \sum_{i=1}^{n} y_i c_{v_i} && \text{Chaleur spécifique à volume constant} \end{aligned} \tag{2.16}$$

Pour trouver la valeur de l'énergie, il suffit d'insérer l'équation (2.16) dans la relation $e = c_v T$ pour obtenir :

$$e = T \sum_{i=1}^{n} y_i c_{v_i} \tag{2.17}$$

Quant à la pression, il est possible de l'obtenir en utilisant l'équation d'état (2.3) combinée avec la loi de Dalton. Ainsi :

$$P = \kappa \rho e = \sum_{i=1}^{n} \kappa_i \rho_i e_i$$

et donc :

$$P = \rho T \sum_{i=1}^{n} \kappa_i y_i c_{v_i} \tag{2.18}$$

Pour ce qui est des dérivées partielles de la pression, il est plus simple de définir κ en fonction des variables thermodynamiques. À partir de l'équation (2.18), on obtient :

$$\kappa = \frac{\sum_{i=1}^{n} \kappa_i \rho_i e_i}{\rho e}$$

et donc :

$$\kappa = \frac{\sum_{i=1}^{n} \kappa_i y_i c_{vi}}{\sum_{i=1}^{n} y_i c_{vi}}$$

Ainsi, les dérivées partielles deviennent donc :

$$P_e = \frac{\partial P}{\partial e} = \kappa\rho$$
$$P_\rho = \frac{\partial P}{\partial \rho} = \kappa e \tag{2.19}$$

Et :

$$P_e = \rho \frac{\sum_{i=1}^{n} \kappa_i y_i c_{vi}}{\sum_{i=1}^{n} y_i c_{vi}}$$

$$P_\rho = T \sum_{i=1}^{n} \kappa_i y_i c_{vi}$$

Puisque l'expression généralisée de la vitesse du son est donnée par :

$$c^2 = \frac{P}{\rho^2} P_e + P_\rho$$

on peut y insérer l'équation d'état (2.18) et ses dérivées (2.19) pour obtenir :

$$c^2 = \kappa\kappa e + \kappa e$$

Avec la relation (2.16) et l'équation (2.17), on obtient une nouvelle expression pour la vitesse du son :

$$c^2 = \left(\frac{\sum_{i=1}^{n} \kappa_i y_i c_{vi}}{\sum_{i=1}^{n} y_i c_{vi}} + 1\right)\left(\sum_{i=1}^{n} y_i \kappa_i c_{v_i}\right) T$$

Une fois toutes ces expressions obtenues, la matrice $\mathcal{S}$ (2.9) peut maintenant être explicitement définie. Ainsi, le terme $H - \frac{c^2\rho}{P_e}$ peut être évalué à l'aide des équations (2.19) et (2.1.7), pour obtenir :

$$H - \frac{c^2\rho}{P_e} = \frac{u^2}{2}$$

Il est à noter qu'avec cette formulation gaz parfait, toutes les propriétés de Roe sont parfaitement respectées, tel que discuté à la section précédente.

2.1.8 Gaz réel

Dans un contexte de simulation de disjoncteurs, il est impératif d'utiliser une approche gaz réel. Pour ce faire, le code est lié à une base de données thermodynamiques similaire à celle utilisée par MC^3. Cependant, afin d'augmenter la vitesse d'exécution du code, il est nécessaire de réduire au minimum les interpolations sur les quantités dérivatives (celles requises à l'évaluation de P_e et P_ρ), qui sont très coûteuses en temps. Ainsi, les nouvelles tables générées pour le modèle contiennent non seulement la pression et la température, fonction de la densité et de l'énergie, mais aussi la vitesse du son c et les chaleurs spécifiques c_p et c_v. De cette façon, les dérivées partielles de la pression sont calculées directement, sans la nécessité d'évaluer les variations locales.

Pour le calcul, il faut tout d'abord définir la chaleur spécifique, c'est-à-dire la capacité d'un système à emmagasiner la chaleur. De par la thermodynamique classique, on en dénote deux : l'une est définie à pression constante (c_p), et l'autre à volume constant (c_v). En définissant la variation infinitésimale de chaleur δq, on obtient donc :

$$c_p = \lim_{dT \to 0} \left(\frac{\delta q}{dT} \right)_P \tag{2.20}$$

$$c_v = \lim_{dT \to 0} \left(\frac{\delta q}{dT} \right)_\rho \tag{2.21}$$

Selon la première loi de la thermodynamique, on peut exprimer δq en fonction de l'énergie interne et de la densité, deux des quatre variables thermodynamiques utilisées :

$$\delta q = de - \frac{P}{\rho^2} d\rho \tag{2.22}$$

Il est aussi possible d'exprimer les différentielles de et $d\rho$ en fonction des deux

autres variables thermodynamiques :

$$d\rho = \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T dP + \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P dT \tag{2.23}$$

$$de = \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T dP + \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P dT \tag{2.24}$$

En combinant ces deux dernières équations à l'équation (2.22), on obtient :

$$\delta q = \left[\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T - \frac{P}{\rho^2}\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T\right] dP + \left[\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P - \frac{P}{\rho^2}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P\right] dT$$

Il suffit donc d'appliquer la relation (2.21) à cette dernière équation pour obtenir c_p :

$$c_p = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P - \frac{P}{\rho^2}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P \tag{2.25}$$

Pour ce qui est de c_v, on doit exprimer la chaleur δq en fonction de dT et de $d\rho$. En combinant les équations (2.22) et (2.24), on obtient :

$$\delta q = \left[\frac{\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T}{\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T} - \frac{P}{\rho^2}\right] d\rho + \left[\frac{\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T - \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P}{\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T}\right] dT$$

Et donc, en appliquant la relation (2.21) à cette équation, on obtient l'expression pour c_v :

$$c_v = \frac{\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T - \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P}{\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T}$$

Il est aussi nécessaire de définir la vitesse du son c, la troisième variable de la table thermodynamique à être lue par le code. Puisqu'elle représente la vitesse de propagation d'une onde de pression dans un milieu sans variation d'entropie, on la

définit comme suit :

$$c^2 = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_s \tag{2.26}$$

où s représente l'entropie. Afin qu'elle soit utile dans le présent développement, cette expression doit être réécrite en fonction des variations de l'entropie et de la densité. La deuxième loi de la thermodynamique nous permet d'écrire :

$$Tds = de - \frac{P}{\rho^2} d\rho \tag{2.27}$$

En combinant cette équation aux formes différentielles (2.24) de façon à éliminer dT et de, on obtient pour dP :

$$dP = \frac{\left[\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P - \frac{P}{\rho^2}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P\right] d\rho - \left[T\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P\right] ds}{\left[\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P\right]}$$

Ainsi, avec cette équation, on peut directement définir la vitesse du son selon l'équation (2.26) :

$$c^2 = \frac{\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P - \frac{P}{\rho^2}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P}{\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P}$$

Maintenant que ces trois quantités ont été correctement définies, il est possible de trouver une expression pour P_e et P_ρ qui en est fonction. La différentielle de la pression en fonction de la densité et de l'énergie nous permet de définir ces deux quantités :

$$dP = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_e d\rho + \left(\frac{\partial P}{\partial e}\right)_\rho de$$

Il est aussi possible de joindre les équations (2.24) en éliminant dT pour obtenir

une autre expression de la différentielle de P en fonction de $d\rho$ et de :

$$dP = \frac{\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P de - \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P d\rho}{\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T}$$

On voit donc qu'en associant ces deux dernières équations, on peut obtenir des équations distinctes pour P_e et P_ρ :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial e}\right)_\rho = \frac{\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P}{\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_e = \frac{-\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P}{\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T}$$

À partir de ces expressions, on note qu'il est possible d'y remplacer l'expression de c_p et c^2 explicitée plus haut, ce qui simplifie grandement les présentes relations :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial e}\right)_\rho = -\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P \frac{c^2}{c_p} \tag{2.28}$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_e = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P \frac{c^2}{c_p} \tag{2.29}$$

Avec ces expressions, il ne reste que deux dérivées partielles à définir. Pour ce faire, il est nécessaire de combiner les deux premières lois de la thermodynamique (équations (2.22) et (2.27)) pour obtenir :

$$T\left(\frac{\partial S}{\partial P}\right)_T = \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T - \frac{P}{\rho^2}\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T$$

Or, à l'aide des relations de Maxwell pour la thermodynamique, cette égalité de-

vient :

$$\frac{T}{\rho^2}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P = \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T - \frac{P}{\rho^2}\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T$$

On voit que l'on peut faire apparaître la partie droite de cette équation en combinant c_p et c_v :

$$\frac{c_p - c_v}{c_v} = \frac{\left[\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T - \frac{P}{\rho^2}\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T\right]\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P}{\left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P - \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P\left(\frac{\partial \rho}{\partial P}\right)_T}$$

On peut simplifier davantage cette équation avec c_p et c^2, en plus d'y insérer l'équation issue de la relation de Maxwell :

$$\frac{c_p - c_v}{c_v} = \frac{c^2}{c_p}\frac{T}{\rho^2}\left(\frac{\partial \rho}{\partial T}\right)_P^2 \tag{2.30}$$

Il suffit maintenant d'insérer cette équation dans l'expression de P_e donnée en (2.28) pour obtenir :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial e}\right)_\rho = \rho c\sqrt{\frac{c_p - c_v}{c_p c_v T}} \tag{2.31}$$

Pour ce qui est de P_ρ, il suffit de remplacer l'expression (2.25) dans (2.29), puis d'y insérer la relation (2.30) :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_e = c^2 - \frac{P}{\rho^2}\rho c\sqrt{\frac{c_p - c_v}{c_p c_v T}} \tag{2.32}$$

Bref, avec les relations (2.31) et (2.32), on obtient les quantités nécessaires à la définition de la matrice jacobienne, et ce, sans perte de généralité et sans évaluation interpolée des quantités dérivatives.

2.1.9 Résultats et validations

Afin de vérifier la validité de la formulation multi-espèces du schéma de Roe proposé, le cas-test du tube à choc a été simulé, dans quatre conditions différentes.

Tube à choc : une espèce

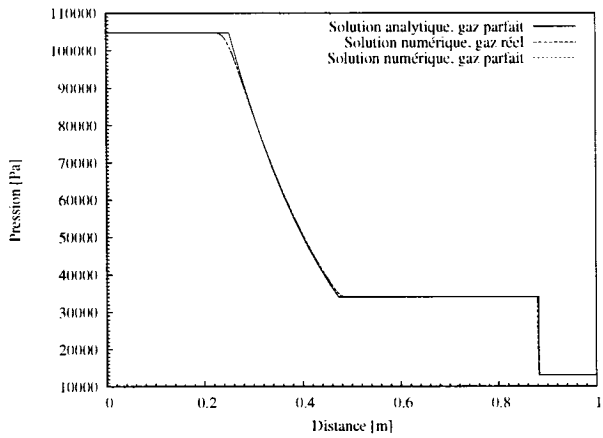
La première validation est un cas très simple, n'utilisant qu'un seul gaz, l'azote. L'avantage de cette simulation est qu'une solution analytique existe, ce qui permet de vérifier les calculs. Le temps de simulation est de 0.7037 milliseconde, le maillage comprend 1001 noeuds et la condition de Courant, Freidricks et Levy (CFL) a une valeur de 1. Les conditions initiales sont présentées au tableau (2.1). Les résultats sont présentés aux figures (2.1a) et (2.1b). On peut y voir que le code reproduit bien le comportement de la pression et de la température, dans le cas d'un gaz parfait et d'un gaz réel.

TAB. 2.1 *Première validation : conditions initiales*

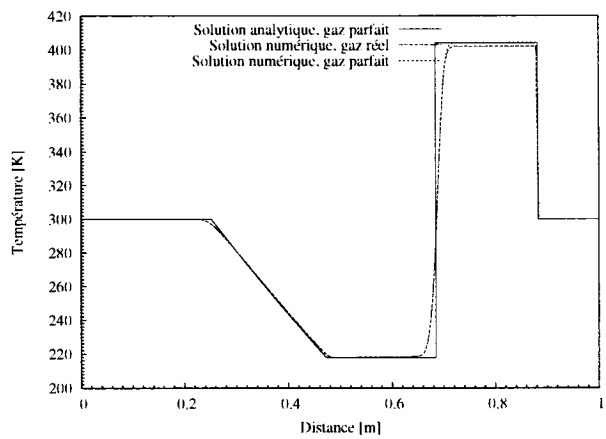
	Gauche	Droite
Température (K)	300	300
Densité (kg/m^3)	1.1769	0.14711
Vitesse (m/s)	0.0	0.0
y_{N_2}	1.0	1.0

Tube à choc : deux espèces

Ce cas-test a été choisi car il permet une comparaison directe avec les résultats publiés par Larrouturou (1990). Les conditions initiales sont indiquées au tableau (2.2). Le temps de simulation est de 0.7037 milliseconde, le maillage contient 101 noeuds, et le CFL est de 0.75. Ces deux dernières valeurs ont été choisies car elles correspondent à celles employées par Larrouturou (1990). Les résultats pour la pression et la température sont présentés à la figure (2.2). On y voit que, bien



(a) *Pression*



(b) *Température*

FIG. 2.1 *Première validation : tube à choc unidimensionnel avec de l'azote de chaque côté*

que les deux solutions ne soient pas identiques, elles reproduisent adéquatement la solution analytique, et ce, malgré le CFL et le faible nombre de noeuds qui induisent une viscosité numérique.

TAB. 2.2 *Deuxième validation : conditions initiales*

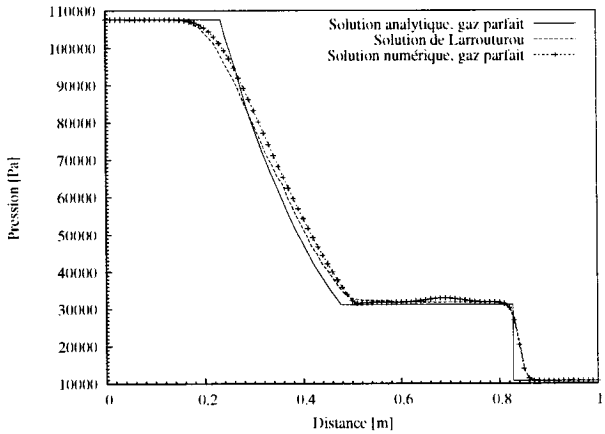
	Gauche	Droite
Température (K)	300	240
Densité (kg/m^3)	1.1769	0.14711
Vitesse (m/s)	0.0	0.0
$y_{\gamma=1.4}$	1.0	0.0
$y_{\gamma=1.2}$	0.0	1.0

Tube à choc : multi-espèces

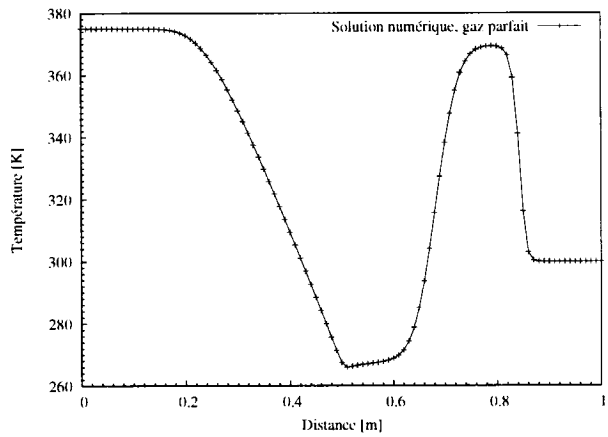
Comme autre cas-test, l'air traité comme un seul gaz est comparé à l'air traité comme un mélange de six gaz différents. Les conditions initiales sont présentées au tableau (2.3) pour l'air multi-espèces. Quant à l'air traité comme un seul gaz, les valeurs de $\kappa = 0.399$ et $c_v = 719.42$ sont utilisées, en plus des valeurs du tableau (2.3). Le maillage comporte 1001 noeuds, le CFL est de 1 et le temps simulé est de 0.7037 milliseconde. La figure (2.3) montre que les solutions numériques sont très proches de la solution analytique. Elle montre aussi que les deux solutions numériques sont parfaitement identiques, confirmant ainsi la validité du traitement des constantes dans l'approche présentée.

Tube à choc : deux gaz différents

Pour ce dernier test, la portion gaz réel du résoluteur est exploitée. Ainsi, à l'initialisation, on place deux gaz différents de part et d'autre du tube, à des conditions initiales de température et de densité identiques. Ainsi, puisque la composition des gaz est différente, il en résulte invariablement que la pression n'est pas la même de

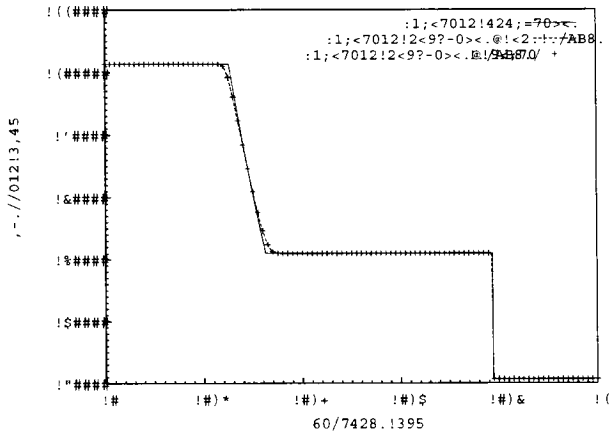


(a) *Pression*

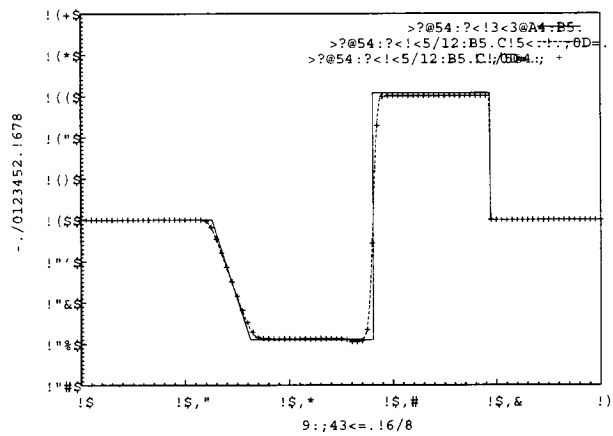


(b) *Température*

FIG. 2.2 *Deuxième validation : tube à choc avec de l'air à gauche et du* SF_6 *à droite*



(a) *Pression*



(b) *Température*

FIG. 2.3 *Troisième validation : tube à choc avec de l'air multi-espèces à gauche et de l'air mono-espèce à droite*

TAB. 2.3 *Troisième validation : conditions initiales*

	Gauche	Droite
Température (K)	300	300
Densité (kg/m^3)	1.1769	0.5884
Vitesse (m/s)	0.0	0.0
y_{N_2}	0.755	0.755
y_{O_2}	0.231	0.231
y_{Ar}	1.29e-2	1.29e-2
y_{CO_2}	5.32e-4	5.32e-4
y_{He}	0.0	0.0
y_{H_2O}	7.00e-9	7.00e-9

chaque côté. Les valeurs utilisées à l'initialisation sont indiquées au tableau (2.4). Les figures (2.4a) et (2.4b) montrent les résultats de calculs faits pour un gaz réel ainsi que pour un gaz parfait. On peut clairement y voir la différence entre les deux approches, encore plus spécifiquement dans la région près du choc.

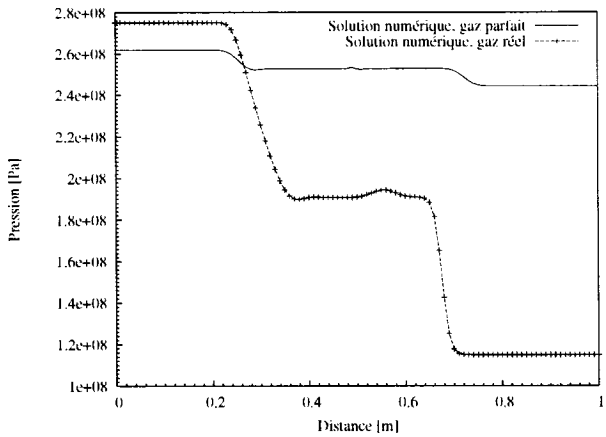
TAB. 2.4 *Quatrième validation : conditions initiales*

	Gauche	Droite
Température (K)	30000	30000
Densité (kg/m^3)	11.769	11.769
Vitesse (m/s)	0.0	0.0
y_{N_2}	1.0	0.0
y_{CO_2}	0.0	1.0

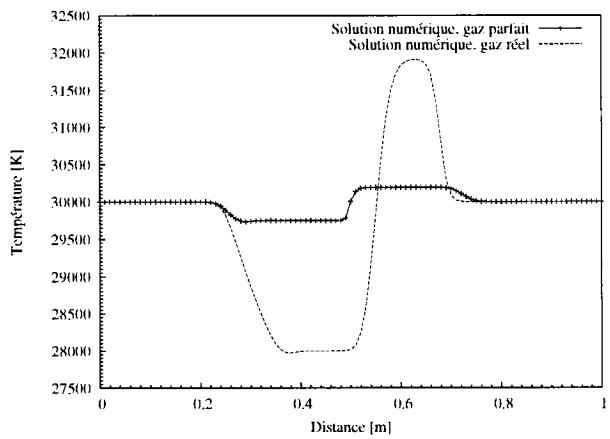
2.2 Modèle axisymétrique

2.2.1 Les équations

Pour permettre une intégration de l'algorithme développé à la section précédente dans le logiciel MC^3, il est nécessaire de définir le problème pour une géométrie axisymétrique. Dans une optique de simulation de disjoncteur, le nombre d'espèces



(a) *Pression*



(b) *Température*

FIG. 2.4 *Quatrième validation : tube à choc avec deux gaz différents de chaque côté, mais à des conditions initiales identiques*

a été limité à trois ; cependant, tel que montré au chapitre précédent, la formulation employée permet d'adapter aisément les équations pour un nombre quelconque d'espèces. Les équations utilisées sont, comme à la section précédente, les équations d'Euler :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \mathcal{F} = \mathbf{S} \quad \text{avec} \quad \mathcal{F} = (\mathbf{F}_r \mathbf{F}_z)$$

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \rho u_r \\ \rho u_z \\ \rho E \end{pmatrix} \qquad \mathbf{F_r} = \begin{pmatrix} \rho_1 u_r \\ \rho_2 u_r \\ \rho_3 u_r \\ \rho u_r u_r + P \\ \rho u_r u_z \\ u_r(\rho E + P) \end{pmatrix}$$

$$\mathbf{F_z} = \begin{pmatrix} \rho_1 u_z \\ \rho_2 u_z \\ \rho_3 u_z \\ \rho u_r u_z \\ \rho u_z u_z + P \\ u_z(\rho E + P) \end{pmatrix} \qquad \mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{m1} \\ S_{m2} \\ S_{m3} \\ S_r + P/r \\ S_z \\ S_e \end{pmatrix}$$

Le système d'équation est complété par une équation d'état du type :

$$P = P(\rho_1, \rho_2, \rho_3, e)$$

ainsi qu'une définition de la densité totale :

$$\rho = \sum_{i=1}^{3} \rho_i$$

Tel que décrit à la section 1.1, ces équations sont résolues sous leur forme intégrale selon une formulation volumes-finis :

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_V \mathbf{U}dV + \oint_{\partial V}(\mathbf{F}_r n_r + \mathbf{F}_z n_z)ds = \int_V \mathbf{S}dV$$

Puis, un vecteur conservatif $\mathbf{U}$ est projeté dans le temps selon la discrétisation explicite suivante :

$$\mathbf{U}^{t+1} = \mathbf{U}^t - \frac{\Delta t}{V}\sum_{k=1}^{N_{\text{côtés}}} \mathbf{F}_k^t L_k + \Delta t \mathbf{S}^t$$

Et le vecteur de flux $\mathbf{F} = \mathbf{F}_r n_r + \mathbf{F}_z n_z$ est calculé ainsi :

$$\mathbf{F} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}_R + \mathbf{F}_L) - \frac{1}{2}\bar{\mathcal{L}}|\bar{\mathcal{D}}|\bar{\mathcal{L}}^{-1}(\mathbf{U}_R - \mathbf{U}_L)$$

où les indices R et L représentent les états du fluide à gauche et à droite de la frontière entre deux éléments du maillage.

2.2.2 Différenciation des équations

En premier lieu, il est impératif de définir un vecteur paramètre :

$$\mathbf{W} = \begin{pmatrix} W_1 \\ W_2 \\ W_3 \\ W_4 \\ W_5 \\ W_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_1 \\ \rho_2 \\ \rho_3 \\ \rho u_r \\ \rho u_z \\ \rho e \end{pmatrix}$$

À l'aide de la règle de dérivation en chaîne, on peut donc écrire :

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{1}{r}\frac{\partial r\mathbf{F}_r}{\partial \mathbf{W}}\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{U}}\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial r} + \frac{\partial \mathbf{F}_z}{\partial \mathbf{W}}\frac{\partial \mathbf{W}}{\partial \mathbf{U}}\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial z} = \mathbf{S}$$

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \mathcal{C}_r \mathcal{M}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial r} + \mathcal{C}_z \mathcal{M}^{-1} \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial z} = \mathbf{S}$$

Ainsi, les matrices $\mathcal{C}_r$, $\mathcal{C}_z$ et $\mathcal{M}$ peuvent être calculées :

$$\mathcal{M} = \frac{\partial \mathbf{U}}{\partial \mathbf{W}} = \mathcal{I}$$

$$\mathcal{C}_r = \begin{pmatrix} u_r - \frac{\rho_1}{\rho} u_r & -\frac{\rho_1}{\rho} u_r & -\frac{\rho_1}{\rho} u_r \\ -\frac{\rho_2}{\rho} u_r & u_r - \frac{\rho_2}{\rho} u_r & -\frac{\rho_2}{\rho} u_r \\ -\frac{\rho_3}{\rho} u_r & -\frac{\rho_3}{\rho} u_r & u_r - \frac{\rho_3}{\rho} u_r \\ -u_r u_r + \frac{\partial P}{\partial W_1} & -u_r u_r + \frac{\partial P}{\partial W_2} & -u_r u_r + \frac{\partial P}{\partial W_3} \\ -u_r u_z & -u_r u_z & -u_r u_z \\ u_r \left(-e - \frac{P}{\rho} + \frac{\partial P}{\partial W_1} \right) & u_r \left(-e - \frac{P}{\rho} + \frac{\partial P}{\partial W_2} \right) & u_r \left(-e - \frac{P}{\rho} + \frac{\partial P}{\partial W_3} \right) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\rho_1}{\rho} & 0 & 0 \\ \frac{\rho_2}{\rho} & 0 & 0 \\ \frac{\rho_3}{\rho} & 0 & 0 \\ 2u_r + \frac{\partial P}{\partial W_4} & \frac{\partial P}{\partial W_5} & \frac{\partial P}{\partial W_6} \\ u_z & u_r & 0 \\ e + \frac{P}{\rho} + u_r \frac{\partial P}{\partial W_2} & u_r \frac{\partial P}{\partial W_5} & u_r \left(1 + \frac{\partial P}{\partial W_6} \right) \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{C}_z = \begin{pmatrix} u_z - \frac{\rho_1}{\rho} u_z & -\frac{\rho_1}{\rho} u_z & -\frac{\rho_1}{\rho} u_z \\ -\frac{\rho_2}{\rho} u_z & u_z - \frac{\rho_2}{\rho} u_z & -\frac{\rho_2}{\rho} u_z \\ -\frac{\rho_3}{\rho} u_z & -\frac{\rho_3}{\rho} u_z & u_z - \frac{\rho_3}{\rho} u_z \\ -u_r u_z & -u_r u_z & -u_r u_z \\ -u_z u_z + \frac{\partial P}{\partial W_1} & -u_z u_z + \frac{\partial P}{\partial W_2} & -u_z u_z + \frac{\partial P}{\partial W_3} \\ u_z \left(-e - \frac{P}{\rho} + \frac{\partial P}{\partial W_1} \right) & u_z \left(-e - \frac{P}{\rho} + \frac{\partial P}{\partial W_2} \right) & u_z \left(-e - \frac{P}{\rho} + \frac{\partial P}{\partial W_3} \right) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \frac{\rho_1}{\rho} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\rho_2}{\rho} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\rho_3}{\rho} \\ u_z & u_r & 0 \\ \frac{\partial P}{\partial W_4} & 2u_z + \frac{\partial P}{\partial W_5} & \frac{\partial P}{\partial W_6} \\ u_z \frac{\partial P}{\partial W_5} & e + \frac{P}{\rho} + u_z \frac{\partial P}{\partial W_2} & u_z \left(1 + \frac{\partial P}{\partial W_6}\right) \end{pmatrix}$$

2.2.3 Termes de pression

Une fois les matrices déterminées, les termes de dérivées de la pression peuvent être définis. En suivant la méthodologie élaborée pour le modèle unidimensionnel, à la section 2.1, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial W_i} &= \frac{Pe}{\rho}\left(\frac{u_r^2 + u_z^2}{2} - e\right) + P_\rho \qquad i = 1, 3 \\ \frac{\partial P}{\partial W_4} &= -\frac{u_r Pe}{\rho} \\ \frac{\partial P}{\partial W_5} &= -\frac{u_z Pe}{\rho} \\ \frac{\partial P}{\partial W_6} &= \frac{Pe}{\rho} \end{aligned}$$

2.2.4 Matrice jacobienne $\mathcal{A}$

Selon la définition, on calcule $\mathcal{A}$ ainsi :

$$\mathcal{A} = \mathcal{C}_r \mathcal{M}^{-1} n_r + \mathcal{C}_\ddagger \mathcal{M}^{-1} n_z$$

On obtient donc :

$$\mathcal{A} = \begin{pmatrix} (1-y_1)u_n & -y_1u_n & -y_1u_n \\ -y_2u_n & (1-y_2)u_n & -y_2u_n \\ -y_3u_n & -y_3u_n & (1-y_3)u_n \\ n_r\left(P_\rho - \frac{P_\epsilon}{\rho}\phi\right) - uu_n & n_r\left(P_\rho - \frac{P_\epsilon}{\rho}\phi\right) - uu_n & n_r\left(P_\rho - \frac{P_\epsilon}{\rho}\phi\right) - uu_n \\ n_z\left(P_\rho - \frac{P_\epsilon}{\rho}\phi\right) - vu_n & n_z\left(P_\rho - \frac{P_\epsilon}{\rho}\phi\right) - vu_n & n_z\left(P_\rho - \frac{P_\epsilon}{\rho}\phi\right) - vu_n \\ u_n\left(P_\rho - \frac{P_\epsilon}{\rho}\phi - H\right) & u_n\left(P_\rho - \frac{P_\epsilon}{\rho}\phi - H\right) & u_n\left(P_\rho - \frac{P_\epsilon}{\rho}\phi - H\right) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} n_ry_1 & n_zy_1 & 0 \\ n_ry_2 & n_zy_2 & 0 \\ n_ry_3 & n_zy_3 & 0 \\ u_rn_r\left(1-\frac{P_\epsilon}{\rho}\right)+u_n & u_rn_z\left(1-\frac{P_\epsilon}{\rho}\right)+u_t & n_r\frac{P_\epsilon}{\rho} \\ u_zn_r\left(1-\frac{P_\epsilon}{\rho}\right)+u_t & u_zn_z\left(1-\frac{P_\epsilon}{\rho}\right)+u_n & n_z\frac{P_\epsilon}{\rho} \\ n_rH - u_r\frac{P_\epsilon}{\rho}u_n & n_zH - u_z\frac{P_\epsilon}{\rho}u_n & \left(1+\frac{P_\epsilon}{\rho}\right)u_n \end{pmatrix}$$

Avec les définitions suivantes :

$$H = E + \frac{u_r^2+u_z^2}{2} = e + \frac{P}{\rho} + \frac{u_r^2+u_z^2}{2}$$

$$\phi = e - \frac{u_r^2+u_z^2}{2}$$

$$u_n = u_rn_r + u_zn_z$$

$$u_t = -u_rn_z + u_zn_r$$

Une fois cette matrice déterminée, toujours selon la méthodologie de la section précédente, on peut la diagonaliser de cette façon :

$$\mathcal{A} = \mathcal{L}\mathcal{D}\mathcal{L}^{-1}$$

où $\mathcal{L}$ et $\mathcal{D}$ sont respectivement la matrice des vecteurs propres et la matrice diagonale des valeurs propres de $\mathcal{A}$. Ainsi :

$$\mathcal{D} = \begin{pmatrix} u_n - c & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_n & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & u_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & u_n + c \end{pmatrix}$$

avec :

$$c^2 = \frac{P}{\rho^2} P_e + P_\rho$$

Puisque les valeurs propres sont dégénérées, les vecteurs associés à $\mathcal{A}$ sont sous-définis. Il est donc important de les choisir adéquatement, pour éviter, par exemple, des divisions par zéro. Ainsi, les vecteurs propres sont :

$$\begin{aligned}
\mathbf{e_1} &= \left[\zeta_1,\ y_2\frac{\zeta_1}{y_1},\ y_3\frac{\zeta_1}{y_1},\ (u - n_r c)\frac{\zeta_1}{y_1},\ (v - n_z c)\frac{\zeta_1}{y_1},\ (H - u_n c)\frac{\zeta_1}{y_1}\right] \\
\mathbf{e_i} &= \left[\zeta_1,\ \zeta_2,\ \zeta_3,\ \zeta_4,\ \frac{1}{n_z}\left(u_n \sum_{j=1}^{3} \zeta_j - n_r \zeta_4\right),\right. \\
&\quad \left. \frac{1}{n_z}\left(\left[n_r uv + n_z\left(e - \frac{\rho P_\rho}{P_e} - \frac{u^2 - v^2}{2}\right)\right]\sum_{j=1}^{3}\zeta_j - u_t\zeta_4\right)\right] \qquad i = 2,3,4,5 \\
\mathbf{e_6} &= \left[\zeta_1,\ y_2\frac{\zeta_1}{y_1},\ y_3\frac{\zeta_1}{y_1},\ (u + n_r c)\frac{\zeta_1}{y_1},\ (v + n_z c)\frac{\zeta_1}{y_1},\ (H + u_n c)\frac{\zeta_1}{y_1}\right]
\end{aligned}$$

Pour obtenir une certaine uniformité pour la matrice $\mathcal{L}$, on pose les valeurs suivantes :

$$
\begin{aligned}
\mathbf{e_1} &: \zeta_1 = y_1 \frac{\rho}{2c} \\
\mathbf{e_2} &: \zeta_1 = 1,\ \zeta_2 = 0,\ \zeta_3 = 0,\ \zeta_4 = u \\
\mathbf{e_3} &: \zeta_1 = 0,\ \zeta_2 = 1,\ \zeta_3 = 0,\ \zeta_4 = u \\
\mathbf{e_4} &: \zeta_1 = 0,\ \zeta_2 = 0,\ \zeta_3 = 1,\ \zeta_4 = u \\
\mathbf{e_5} &: \zeta_1 = 0,\ \zeta_2 = 0,\ \zeta_3 = 0,\ \zeta_4 = -\rho n_z \\
\mathbf{e_6} &: \zeta_1 = y_1 \frac{\rho}{2c}
\end{aligned}
$$

ce qui donne :

$$
\mathcal{L} = \begin{pmatrix}
\frac{\rho}{2c} y_1 & 1 & 0 & 0 & 0 & \frac{\rho}{2c} y_1 \\
\frac{\rho}{2c} y_2 & 0 & 1 & 0 & 0 & \frac{\rho}{2c} y_2 \\
\frac{\rho}{2c} y_3 & 0 & 0 & 1 & 0 & \frac{\rho}{2c} y_3 \\
\frac{\rho}{2c}(u - n_r c) & u & u & u & -\rho n_z & \frac{\rho}{2c}(u + n_r c) \\
\frac{\rho}{2c}(v - n_z c) & v & v & v & \rho n_r & \frac{\rho}{2c}(v + n_z c) \\
\frac{\rho}{2c}(H - u_n c) & H - \frac{\rho c^2}{P_e} & H - \frac{\rho c^2}{P_e} & H - \frac{\rho c^2}{P_e} & \rho u_t & \frac{\rho}{2c}(H + u_n c)
\end{pmatrix}
$$

Avec ces matrices définies, il est maintenant possible de formuler le schéma de Roe de la même manière que pour un écoulement unidimensionnel (sections 2.1.6 à 2.1.8).

2.2.5 Coefficients TAC

Pour ce qui est de la base de données des coefficients d'absorption totale (en anglais, «Total Absorption Coefficients» ou TAC), elle peut maintenant être générée en fonction de la composition du gaz présent. Ainsi, grâce à ces données, il est maintenant possible de faire un calcul qui utilise la composition du plasma pour déterminer les propriétés thermodynamiques, mais aussi pour déterminer l'émission

radiative.

Il est toutefois à noter que pour alléger le code, déjà bien lourd, il est nécessaire de réduire au maximum le pas de composition utilisé pour générer les tables. En effet, non seulement un trop petit pas augmente considérablement l'espace-mémoire occupé par la table, mais l'interpolation et la recherche y est plus fastidieuse. Comme cette table est utilisée régulièrement tout au long d'une simulation, la réduction de ce temps d'accès est primordiale.

2.3 Résultats

2.3.1 Tube à choc

Pour faire suite aux simulations faites à la section 2.1, un tube à choc rempli de SF_6, cette fois axisymétrique, est ici présenté. Le tableau (2.5) donne les conditions initiales de la simulation. Cette dernière est comparée à la solution analytique, tel que présenté aux figures (2.6) et (2.5). Comme on peut le voir, la solution numérique se compare à la solution théorique.

TAB. 2.5 *Conditions initiales pour le tube à choc axisymétrique*

	Gauche	Droite
Température (K)	300	300
Pression (atm)	1	0.1251
Vitesse (m/s)	0.0	0.0
y_1	1	0
y_2	0	1
y_3	0	0

2.3.2 Cylindre et bulle d'hélium

Cette validation permet de comparer les simulations du nouvel algorithme avec des résultats expérimentaux faits par Hass et Sturtevant (1987). Ces résultats ont

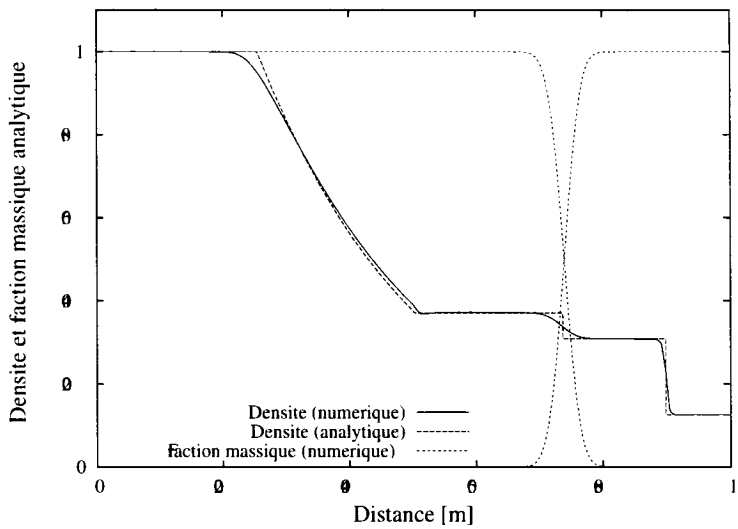


FIG. 2.5 *Densité adimensionnelle pour le tube à choc axisymétrique (les valeurs sont prises à la paroi du tube).*

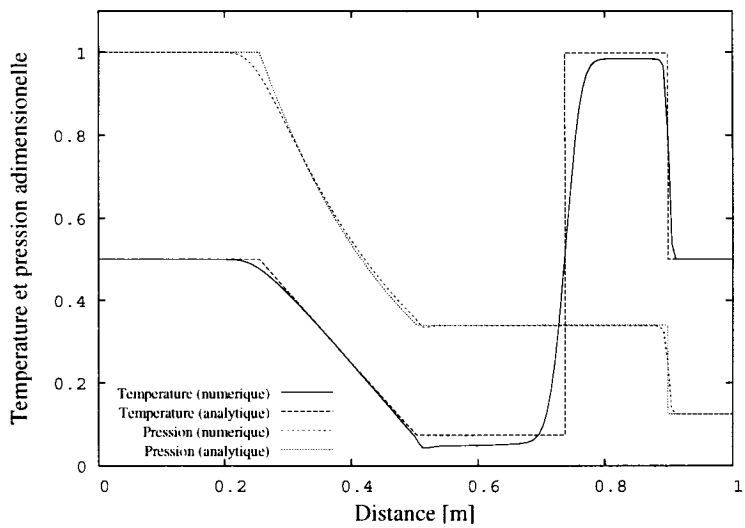


FIG. 2.6 *Température et pression adimensionnelles pour le tube à choc axisymétrique (les valeurs sont prises à la paroi du tube).*

été obtenus en photographiant une petite bulle de savon contenant de l'hélium alors qu'une onde de choc la traverse. La bulle, d'un diamètre de 4.5 cm, est dans un milieu ambiant (air), aux conditions atmosphériques normales, et l'onde de choc est d'une grandeur de $M_s = 1.25$. Lorsque le choc traverse la bulle, la membrane de savon se brise et l'hélium est libéré : comme l'expérience a lieu pendant un court laps de temps, la diffusion n'entre pas en jeu, et seuls les gradients de pression ont un effet dispersif sur le gaz. Une simulation des mêmes conditions expérimentales a donc été effectuée, sans toutefois prendre en considération la membrane de savon. Les comparaisons entre l'expérience et la simulation sont présentées à la figure (2.7). Le graphique de la figure (2.8) présente l'évolution des différents fronts de la bulle.

L'expérience a aussi été réalisée pour un cylindre d'hélium de 5 cm de diamètre, dont la paroi externe, d'une épaisseur de 0.5 μm, est composée de nitrocellulose. Comme pour la bulle, cette paroi se dissout lorsque le choc la traverse ($M_s = 1.25$). Les figures (2.9) et (2.10) présentent la comparaison qualitative (densité) entre l'expérience et la simulation, alors que la figure (2.11) présente les isolignes de pression. Sur cette dernière figure, on constate un léger retard de l'onde de pression à l'intérieur du cylindre, lors la simulation. Cette différence est due au fait que l'onde de choc voyage beaucoup plus rapidement dans la membrane de nitrocellulose ; or, celle-ci n'est pas prise en considération dans la simulation.

2.3.3 Injection constante d'un gaz dans un tube

Cette validation a pour but de vérifier que la présente modification au schéma de Roe conserve la physique décrites par les équations d'Euler. Pour ce faire, le code simule l'injection constante d'un gaz dans un volume fermé sur une très longue période de temps ; de cette façon, il est aisé de calculer la valeur théorique de l'énergie et de la masse que devrait contenir le volume. Afin de reproduire le plus fidèlement les conditions dans lesquelles ce nouveau code sera utilisé, le volume

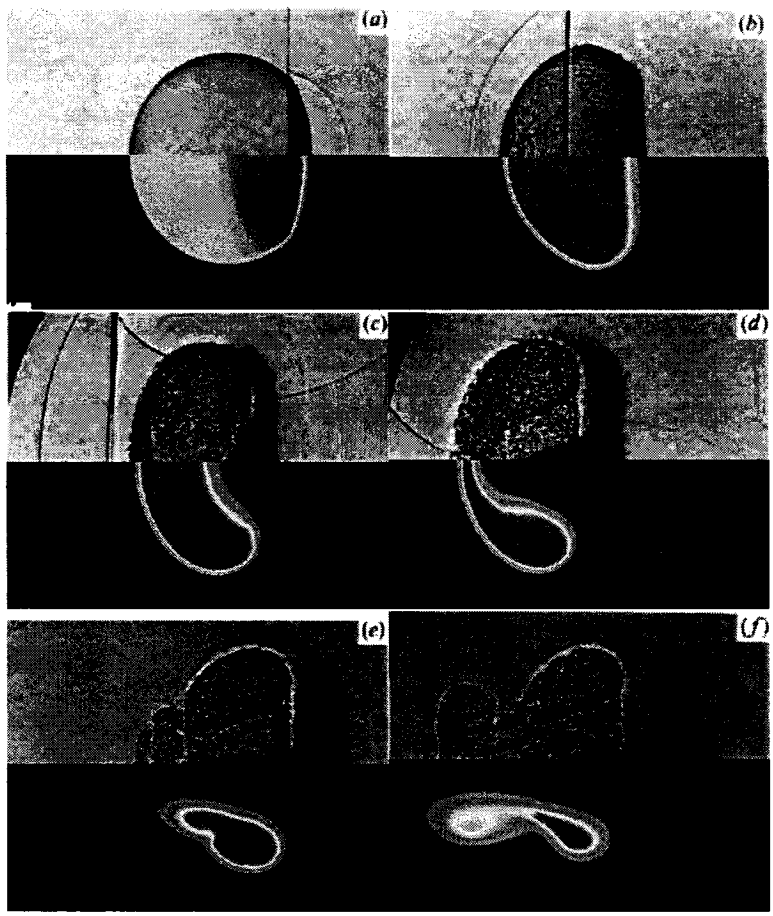


FIG. 2.7 *Simulation d'une bulle d'hélium traversée par un choc de grandeur* $M_s = 1.25$ *(52 isolignes de densité, entre 0.001 et* $\approx$ *0.025 kg/m*^{3}*), comparée aux photographies de Hass et Sturtevant (1987); (a)* $t = 20$ μs*, (b)* $t = 82$ μs*, (c)* $t = 145$ μs*, (d)* $t = 223$ μs*, (e)* $t = 350$ μs*, (f)* $t = 600$ μs

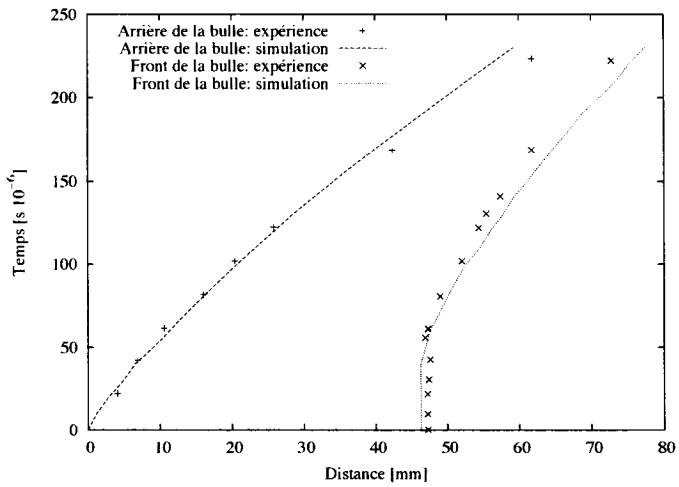


FIG. 2.8 *Propagation de la frontière avant et arrière de la bulle d'hélium après le passage d'un choc de* $M_s = 1.25$ *: comparaison entre la simulation et les résultats expérimentaux de Hass et Sturtevant (1987)*

choisi est un cylindre, et le gaz est injecté radialement, partout sur la paroi. Le gaz utilisé est du SF_6 et est initialement au repos à une température de 300 K et à une pression de 1 atm. Le gaz injecté, aussi du SF_6, est lentement ajouté pendant 3 secondes de simulation. Les résultats sont présentés sur la figure (2.12), pour la pression : on peut y voir que celle-ci augmente de façon constante partout dans le volume. Sur la figure (2.13), on peut voir la progression du gaz d'injection dans le volume ; à cause de celui-ci, le gaz initial est comprimé adiabatiquement, ce qui a pour effet d'augmenter la température et la densité, comme on le voit sur les figures (2.14) et (2.15).

Afin de vérifier que la masse et l'énergie sont préservées, il suffit de faire l'intégrale des valeurs de l'énergie et de la densité sur le volume, et de comparer avec les valeurs théoriques. Le tableau (2.6) donne le pourcentage de la différence entre les valeurs théoriques et les valeurs calculées, à différents temps de calcul. Comme

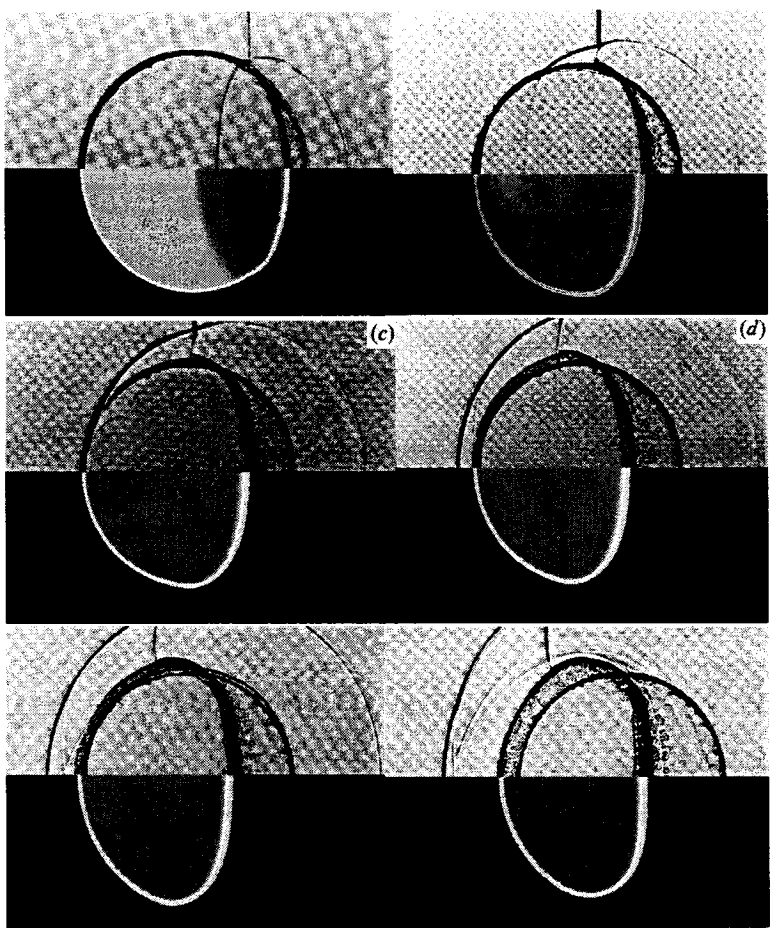


FIG. 2.9 *Simulation d'un cylindre d'hélium traversé par un choc de grandeur* $M_s = 1.22$ *(52 isolignes de densité, entre 0.001 et* $\approx$ *0.025 kg/m*^{3}*), comparée aux photographies de Hass et Sturtevant (1987) : (a)* $t = 32$ μs*, (b)* $t = 52$ μs*, (c)* $t = 62$ μs*, (d)* $t = 72$ μs*, (e)* $t = 82$ μs*, (f)* $t = 102$ μs

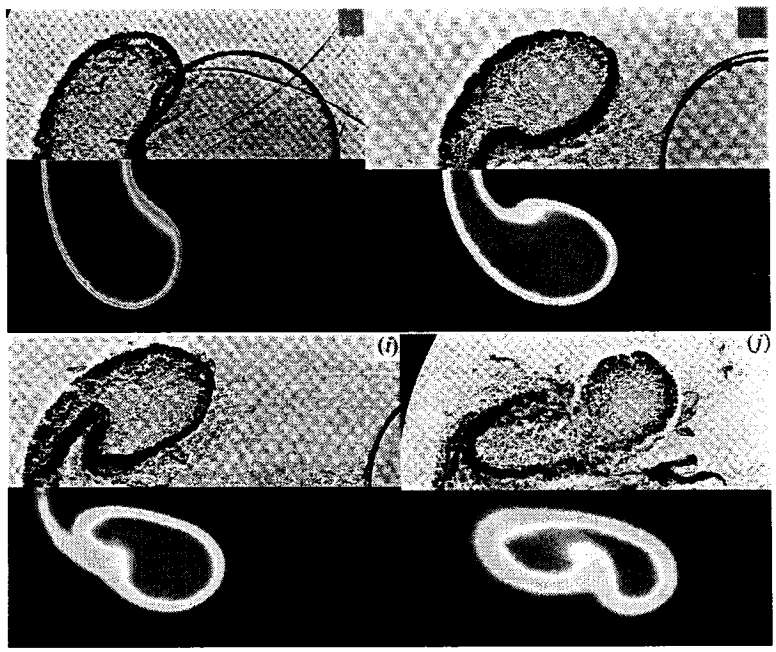


FIG. 2.10 *Simulation d'un cylindre d'hélium traversé par un choc de grandeur* $M_s = 1.22$ *(52 isolignes de densité, entre 0.001 et* $\approx$ *0.025 kg/m*^{3}*), comparée aux photographies de Hass et Sturtevant (1987) : (g)* $t = 245$ μs*, (h)* $t = 427$ μs*, (i)* $t = 674$ μs*, (j)* $t = 983$ μs

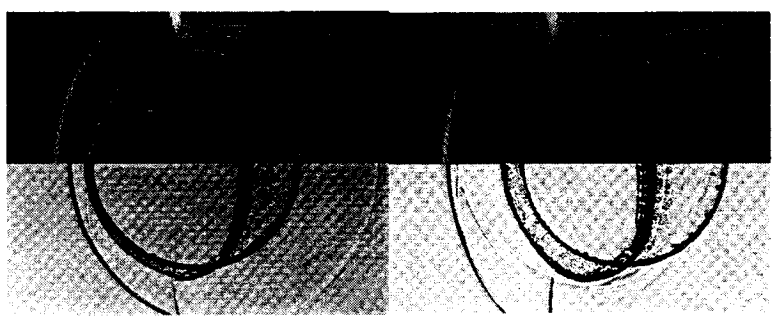


FIG. 2.11 *Simulation d'un cylindre d'hélium traversé par un choc de grandeur* $M_s = 1.22$ *(52 isolignes de pression, de 1.01 à 1.85 bar), comparée aux photographies de Hass et Sturtevant (1987) : (a)* $t = 72$ μs*, (b)* $t = 102$ μs

on le voit, les différences entre les deux valeurs sont à peu près négligeables.

TAB. 2.6 *Différence entre les valeurs théoriques et calculées*

t [s]	Mass [%]	Energy [%]
1	0.0042	0.0040
2	0.0059	0.0056
3	0.0059	0.0055

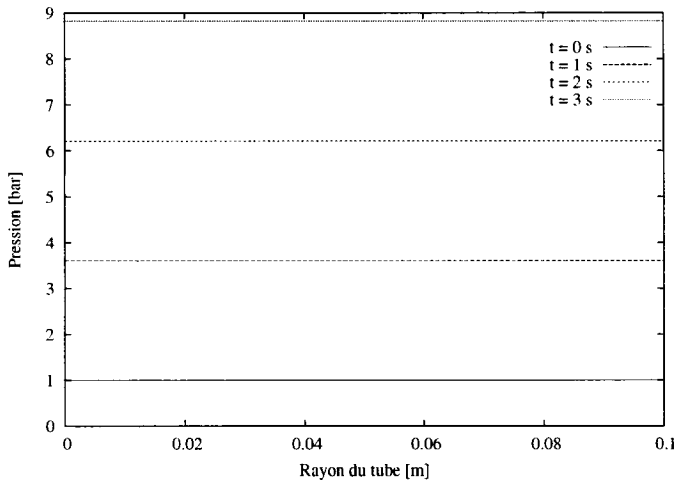


FIG. 2.12 *Distribution de la pression à différents temps*

2.3.4 Simulation d'un disjoncteur expérimental

Comme dernière simulation, le disjoncteur expérimental de Lewis (1987) est étudié. Puisque ce modèle a été utilisé maintes fois au cours des dernières années pour valider MC^3 (Eby *et al.* 1998, Godin *et al.* 2000), l'intérêt est évident. Contrairement aux autres simulations de cette thèse, celle-ci est faite avec le schéma du premier ordre pour des raisons de rapidité de calcul. Par rapport aux études

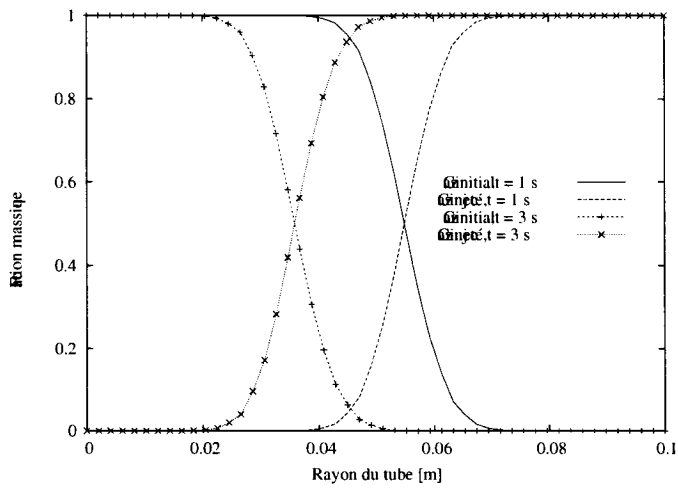


FIG. 2.13 *Fraction massique des gaz à $t = 1s$ et $t = 3s$*

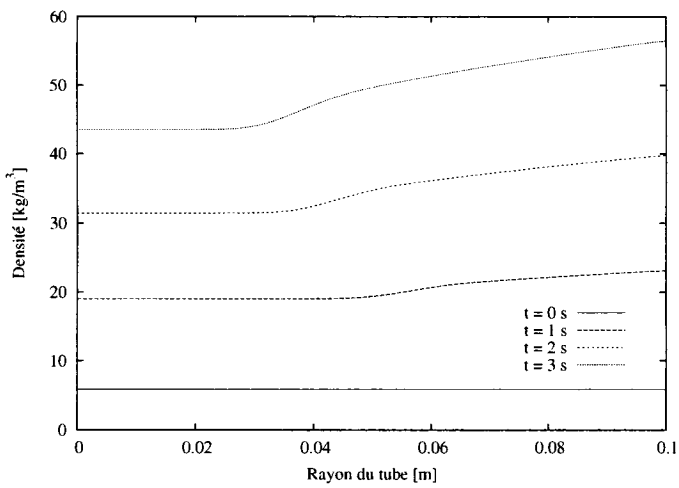


FIG. 2.14 *Distribution de la densité pour différents temps*

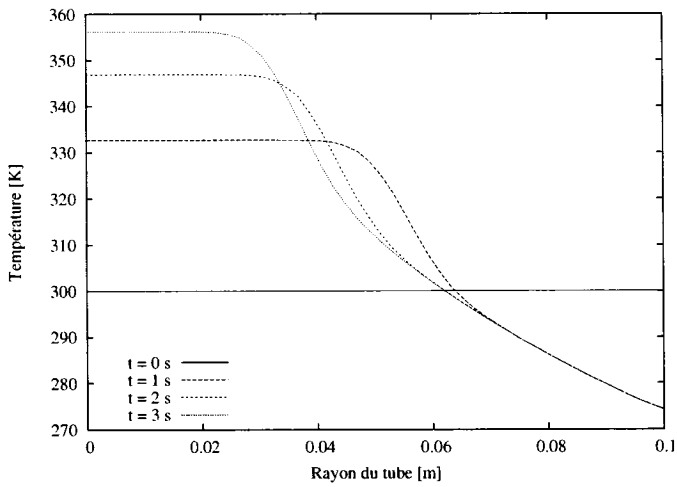


FIG. 2.15 *Distribution de la température pour différents temps*

précédentes, les nouveaux ajouts font en sorte qu'il est maintenant possible de visualiser la progression des vapeurs de PTFE dans la chambre de coupure. De plus, dans la version précédente, le gaz injecté était le même que celui de la chambre ; dorénavant, trois gaz différents peuvent être pris en considération, ce qui rend le calcul des relations thermodynamiques et radiatives beaucoup plus précis, puisqu'il tient compte localement de la concentration de chaque gaz. Bref, avec ces nouveaux ajouts, la région proche de la paroi est assurément différente. La figure (2.16) présente les résultats du calcul pour la densité du PTFE ablaté. On y voit clairement la couche de PTFE injectée dans la chambre de coupure. Les figures (2.17) et (2.18) présentent la comparaison entre les valeurs expérimentales de Lewis (1987) et les valeurs de la simulation pour la pression mesurée à divers endroits sur la paroi du disjoncteur. On y constate que la simulation se compare de façon admirable avec la réalité.

Les résultats au préalablement obtenus par Godin *et al.* (2000) sont aussi

inclus, afin de démontrer l'apport du nouvel algorithme. On voit clairement que les nouveaux ajouts se traduisent par une nette amélioration du modèle. La courbe numérique s'éloigne beaucoup moins des données expérimentales, surtout en fin de simulation. Étant donné que les mesures sont prises près de la paroi, c'est-à-dire à l'endroit où a lieu l'ablation, ces résultats démontrent directement les apports du traitement multi-espèces.

Il est à noter que les résultats présentés à la figure (2.18) sont moins précis que ceux de la figure (2.17). Puisque les sites de mesure P3 et P4 sont situés tout près de l'étranglement de la buse, l'ablation à cet endroit est plus importante. Comme la quantité de matière ablatée à une forte incidence sur la pression, ces écarts peuvent être expliqués par la façon dont cette quantité est évaluée. Le modèle actuel, présenté à la section 1.5 et validé à la section 2.4, est fortement dépendant du calcul radiatif à la paroi. Afin d'obtenir de meilleurs résultats, il est donc nécessaire de mettre à jour ce calcul. Le modère P-1, bien que nettement supérieur au modèle NEC, reste une approximation simpliste de la réalité. Afin d'améliorer les résultats, l'implémentation d'un modèle plus complexe, comme celui des caractéristiques partielles, est à envisager.

La figure (2.18) compare la différence de potentiel aux bornes de l'arc avec les résultats de Lewis (1987). Bien que les deux courbes présentent une progression similaire, et surtout parallèle, on note un écart important explicable par plusieurs phénomènes. Tout d'abord, la perte de potentiel dans les électrodes n'est pas ici calculée, de même que celle de la couche hors-équilibre adjacente. L'utilisation de l'algorithme de calcul développé par Maruzewski *et al.* (2002) pourrait pallier à ce manquement. La méthode employée pour le calcul radiatif sur les électrodes a aussi une incidence puisqu'elle modifie directement la façon donc l'arc est modélisé. Finalement, la présence de vapeurs métalliques près des électrodes contribue aussi à une perte de potentiel qui, pour cette géométrie, pourrait avoir une influence sur le voltage de l'arc. Cela dit, la progression parallèle des deux courbes démontre une

bonne concordance entre le modèle et la réalité.

FIG. 2.16 *Densité du PTFE ablaté dans le disjoncteur de Lewis, avec un arc de 300A, à t=1.6 ms. Les valeurs vont de 0 à 0.02 kg/m^3, alors que pour le SF_6, elles ont une valeur maximale de 44 kg/m^3*

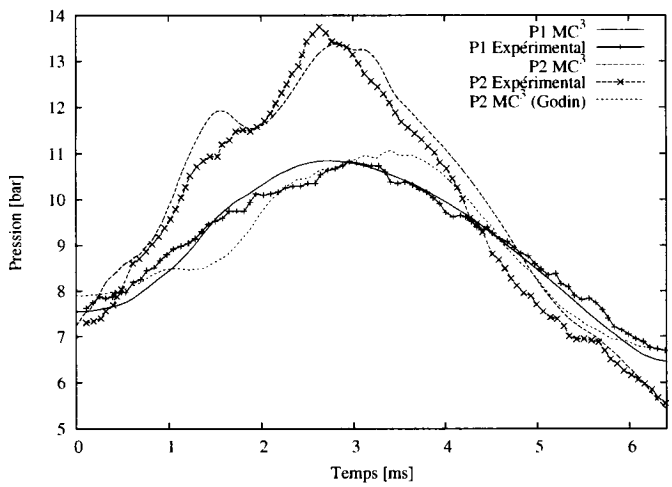


FIG. 2.17 *Évolution de la pression pour un courant sinusoïdal de 56 kA. Les mesures sont prises à -80 mm et -5 mm de l'étranglement de la buse (conditions frontières de Marshak pour le calcul radiatif du site P1, Dirichlet pour le site P2)*

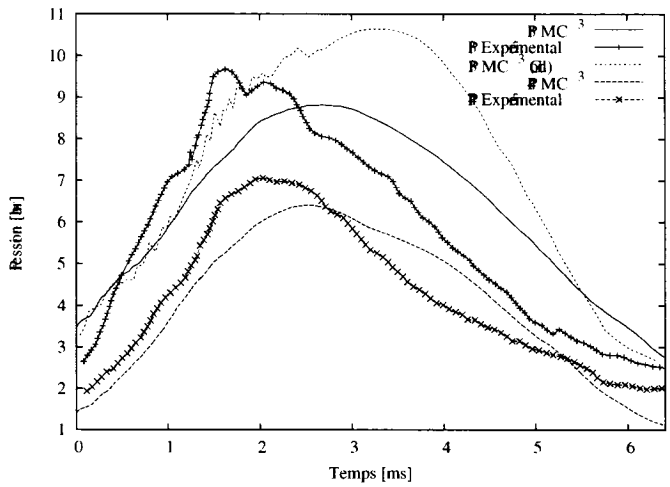


FIG. 2.18 *Évolution de la pression pour un courant sinusoïdal de 56 kA. Les mesures sont prises à -0 mm et -36 mm de l'étranglement de la buse (conditions frontières de Dirichlet pour le calcul radiatif)*

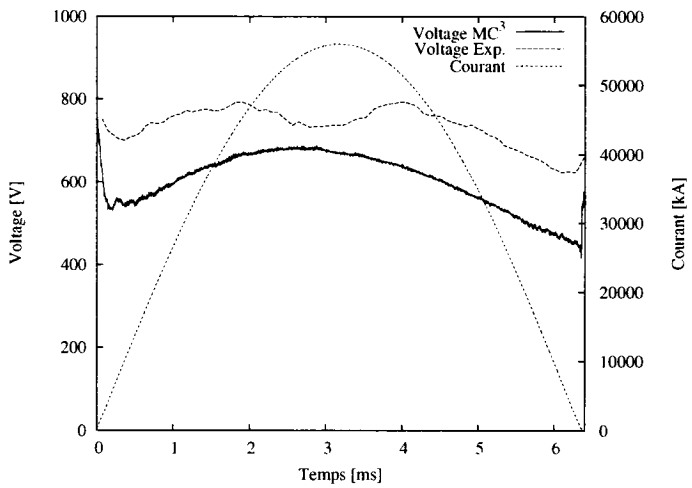


FIG. 2.19 *Évolution du voltage de l'arc pour un courant sinusoïdal de 56 kA*

2.4 Ablation multi-espèces

2.4.1 Précision sur le modèle

Tel que discuté à la section 1.5, l'ablation dépend fortement de la radiation incidente à la paroi. Or, comme à peu près tout ce qui a trait à la radiation, la théorie est ici assez simple, mais l'application difficile. La complexité se situe au niveau de la détermination des valeurs à être utilisées. Comme on l'a vu, le débit de matière ablatée injectée est directement proportionnel à la radiation incidente générée par l'arc électrique. Avec cette quantité, il suffit donc de calculer l'enthalpie nécessaire à évaporer la paroi, et on trouve le débit massique.

La première difficulté de ce calcul est d'évaluer correctement la radiation incidente. Dans le cas de Ruchti et Niemeyer (1986), le modèle exploratoire employé utilise une fraction de l'énergie ohmique de l'arc électrique (environ 30%), supposant que l'autre partie est réabsorbée par l'arc. La valeur de ce facteur est déterminée à l'aide des résultats expérimentaux. Dans un article référençant Ruchti, Müller (1993) fait une description plus exhaustive de l'absorption radiative, permettant de mieux cerner les phénomènes présents et ainsi mieux calibrer le modèle. On y tient compte de l'énergie réabsorbée par l'arc, de l'énergie dissipée sous forme de chaleur dans la paroi, de l'énergie utilisée pour évaporer la paroi et, finalement, de l'énergie quittant le système. Par contre, l'énergie radiative émise par l'arc est toujours basée sur un modèle simpliste. Dans une publication récente, Osawa et Yoshioka (2003) utilisent 25% de la radiation de l'arc, mais utilisent aussi la loi de Beer-Lambert pour décrire la pénétration de la radiation à la surface et à l'intérieur de la paroi. Dans le cas du modèle utilisé par MC^3, le calcul exhaustif de l'énergie radiative émise par l'arc permet d'atteindre un bon niveau de précision sur cette partie du calcul. Ainsi, le modèle P-1 implanté par Eby et Trépanier (1998) permet directement de connaître la quantité d'énergie sortant de l'arc. Il reste donc à déterminer la fraction de l'énergie qui est dissipée en chaleur dans la paroi, ainsi

que celle qui quitte le système.

La deuxième difficulté du calcul est la détermination de la valeur de l'enthalpie d'ablation. Cette dernière est définie comme étant l'énergie nécessaire pour amener le PTFE de sa température initiale (environ 300 K) jusqu'à celle de son injection (environ 3500 K). On peut résumer ce processus en deux étapes : la première est celle où le PTFE est amené à sa température de vaporisation (environ 1000 K), et la seconde, correspondant à la photoablation, est celle où il atteint l'état d'injection. Lors du calcul de la quantité d'énergie nécessaire pour l'ablation, on doit donc inclure les valeurs énergétiques correspondant à ces deux étapes.

À l'origine, les calculs faits par MC^3 ne tenaient compte que d'une seule espèce ; on supposait donc, à tort, que le gaz issu de l'ablation était le même que celui présent dans la chambre de coupure. Avec les nouvelles fonctionnalités apportées par les présents travaux, il est maintenant possible de connaître la composition chimique partout, et surtout, d'injecter le gaz qui correspond à l'espèce ablatée.

2.4.2 Amélioration sommaire au modèle

Une des lacunes du modèle de MC^3 (section 1.5) est de ne pas tenir compte du calcul de la température à l'intérieur de la paroi, et donc à la surface même : dans le développement décrit, cette température est choisie (1000 K), et non pas calculée. L'évaluation de cette distribution de température est loin d'être un problème trivial, puisqu'on doit prendre en considération la vitesse d'ablation (problème de Stefan). Cependant, il est possible d'améliorer nettement le modèle en utilisant la relation de Clausius-Clapeyron, qui permet de calculer la température de vaporisation en fonction de la pression :

$$T_{\text{paroi}} = \frac{-T_{\text{crit}}}{\ln\left(P_{\text{paroi}}/P_{\text{crit}}\right)}$$

où, pour le PTFE, $P_{\text{crit}} = 1.84 \times 10^{15}$ Pa et $T_{\text{crit}} = 20813$ K (Mikellides 1999). Quant à P_{paroi}, on l'estime à la pression interne adjacente à la paroi. Comme on

peut le voir sur le graphique de la figure (2.20), la valeur de la température est aux environs de 1000 K, mais est loin d'être constante. Cette façon de faire a une incidence directe sur le modèle d'ablation puisque ceci modifie à la fois h_v et δh_a dans l'équation d'ablation (1.5) (voir l'annexe III pour les détails). Notons finalement qu'un modèle d'ablation permettant de tenir compte du problème de Stefan est présenté au chapitre 3.

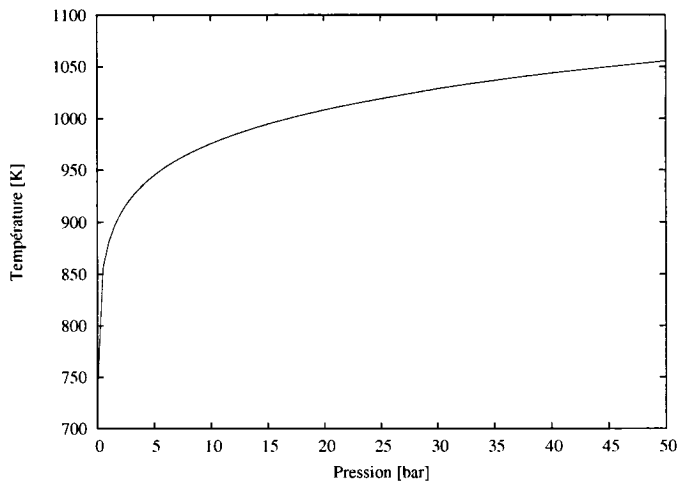


FIG. 2.20 *Température de vaporisation en fonction de la pression ambiante pour le PTFE, selon la relation de Clausius-Clapeyron.*

2.4.3 Résultats : tube de Ruchti

Cette validation a pour but de comparer les résultats de la simulation avec des données expérimentales. Cette comparaison avait d'ailleurs déjà été faite par Godin *et al.* (2000), avec les lacunes énoncées précédemment. Pour faire un parallèle avec la description quantitative de l'ablation que font Ruchti et Niemeyer (1986), les simulations ont été faites pour plusieurs valeurs de la température d'injection T_V,

ainsi que pour plusieurs valeurs de la fraction de radiation incidente f. L'expérience consiste à faire passer un arc électrique à courant constant dans un tube de rayon de 6 mm et de longueur de 75 mm.

Comme on peut le voir sur les figures (2.21) à (2.23), les simulations sont dans la même région que les résultats expérimentaux. On constate aussi que, tenant compte des trois graphiques, les valeurs de $f = 0.8$ et de $T_V = 3400$ K semblent les valeurs les plus fidèles. De plus, en comparant avec les résultats des simulations faites par Godin *et al.* (2000) avec l'ancienne version de MC^3, on note une nette amélioration quant à la tendance des courbes. Puisque les effets multi-espèces n'ont pas d'incidence sur cette simulation, les mesures étant prises à l'état stationnaire, l'amélioration est donc imputable aux modifications mineures du modèle d'ablation.

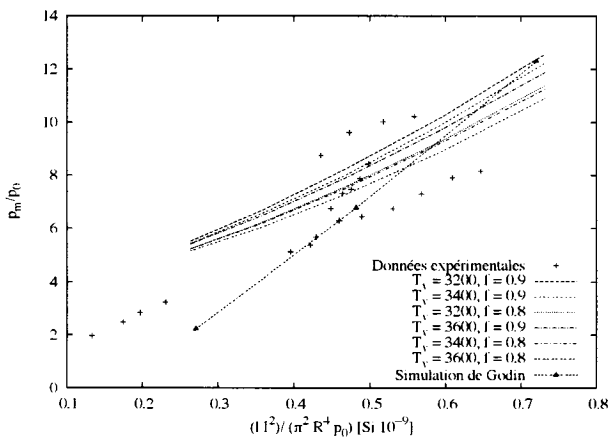


FIG. 2.21 *Pression totale adimensionnelle en fonction de la longueur du tube L, du rayon du tube R, de la pression à la sortie p_0 et du courant de l'arc I pour différentes valeurs de f et T_V. Les résultats sont comparés aux données expérimentales de Ruchti et Niemeyer (1986) et aux simulations faites par Godin et al. (2000)*

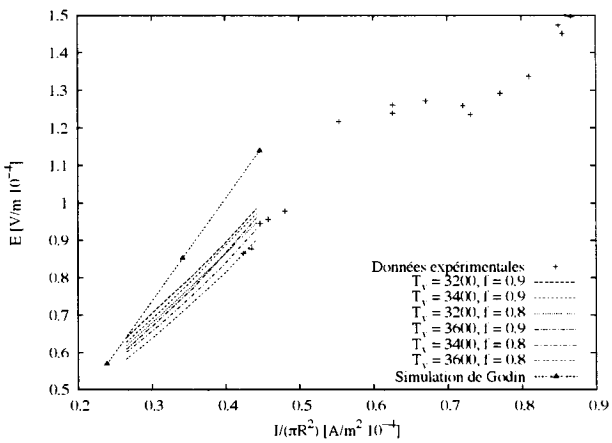


FIG. 2.22 *Champ électrique E en fonction du rayon du tube R et du courant de l'arc I pour différentes valeurs de f et T_V. Les résultats sont comparés aux données expérimentales de Ruchti et Niemeyer (1986) et aux simulations faites par Godin et al. (2000)*

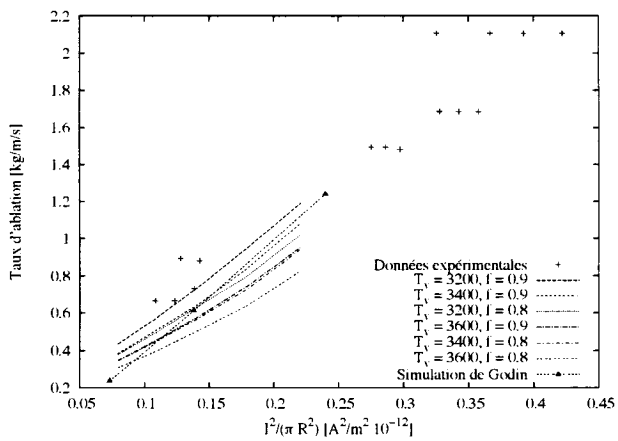


FIG. 2.23 *Taux d'ablation ṁ en fonction du rayon du tube R et du courant de l'arc I pour différentes valeurs de f et T_V. Les résultats sont comparés aux données expérimentales de Ruchti et Niemeyer (1986) et aux simulations faites par Godin et al. (2000)*

CHAPITRE 3

COUPLAGE PAROI-PLASMA

Tel que discuté à la section 1.5, la méthode utilisée pour évaluer le taux d'ablation est obtenue des suites de généralisations quant à la nature transitoire du phénomène. Selon cette méthodologie, l'ablation est directement proportionnelle à la quantité d'énergie radiative incidente. On ne tient donc pas compte du laps de temps nécessaire à chauffer la paroi, temps pendant lequel il n'y a pas d'ablation. De plus, on omet l'influence du gaz ambiant ; or, l'état thermodynamique du plasma d'arc peut avoir des effets importants sur la quantité de matière ablatée. Grâce à de récents avancements dans une discipline connexe, l'ablation laser, il est maintenant possible de définir plus précisément les interactions en jeu, et ainsi obtenir un modèle d'ablation plus précis. De plus, en modifiant la méthode et en la couplant avec une équation de transfert de chaleur, il est aussi possible de déterminer la température de la paroi, de même que son érosion.

3.1 Modèle de Keidar

Ce modèle, élaboré par Keidar, Boyd et Beilis, a pour but de formaliser l'ablation du PTFE dans les propulseurs à plasma pulsés (en anglais, «Pulsed Plasma Thruster» ou PPT), engin utilisé pour corriger la trajectoire orbitale de petits satellites. Le fonctionnement est simple : un arc électrique génère un plasma où des barres de PTFE sont insérées. L'ablation de ces dernières crée un gaz qui, lorsqu'éjecté, propulse le véhicule sur lequel le PPT est installé. La méthode de Keidar *et al.* (2001) modélise l'ablation en tenant compte du plasma ambiant et d'une couche mince limitrophe à la paroi.

Dans l'élaboration du problème, trois sections sont prises en considération, tel

qu'illustré à la figure (3.1). La première, tout juste sur la surface de PTFE est une couche cinétique hors équilibre, d'une épaisseur de quelques libres parcours moyens (lpm), et est appelée *Couche de Knudsen*. La seconde, quant à elle, est une couche hydrodynamique hors équilibre où les collisions entre particules sont dominantes et où les électrons et les particules lourdes n'ont pas la même température. La troisième section correspond au plasma et est considérée à l'équilibre thermodynamique local (LTE). Ainsi, à la frontière entre le plasma et la couche hydrodynamique, les ions et les électrons ont la même température. La dénomination suivante est attribuée à chaque frontière (figure (3.1)) : les variables de la frontière entre le PTFE et la couche de Knudsen portent l'indice a, celles entre la couche hydrodynamique et celle de Knudsen portent l'indice b, et celles entre le plasma et la couche hydrodynamique portent l'indice c.

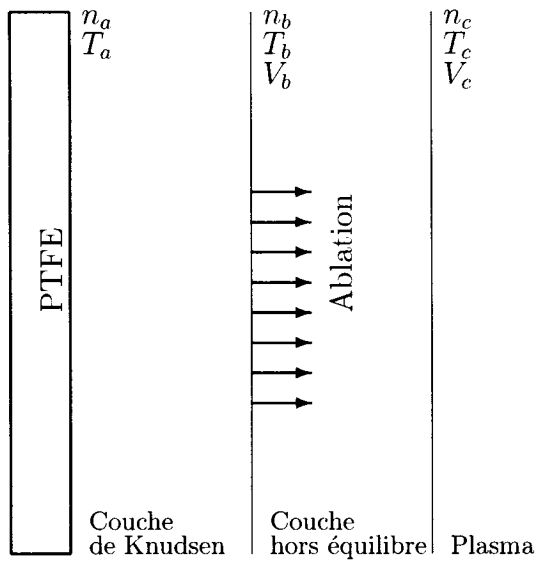


FIG. 3.1 *Domaine de calcul pour le modèle d'ablation de Keidar*

3.1.1 Couche de Knudsen

Quand la pression est à sa valeur ambiante, dans des conditions de saturation, la distribution de vitesse est considérée comme semi-maxwellienne, avec comme valeur moyenne une vitesse nulle, que ce soit pour les particules évaporées vers l'avant ou pour les particules dispersées vers l'arrière. Par contre, dans le cas où l'évaporation est très forte, et donc, que la pression de la vapeur est élevée, la quantité de particules dispersées vers l'arrière devient négligeable, ce qui fait en sorte que le gaz n'est plus du tout à l'équilibre. C'est cette région, tout près de la paroi, que l'on appelle la *Couche de Knudsen*. Dans sa définition classique, cette couche fait le passage entre la paroi et la région à l'équilibre. Par contre, dans l'application ici décrite, une seconde couche de transition hydrodynamique est ajoutée.

Afin de déterminer les relations hydrodynamiques de la région près de la paroi lorsqu'il y a ablation, il est nécessaire de résoudre l'équation de Boltzmann (II.8) dans la couche de Knudsen. Les hypothèses mathématiques et physiques menant à l'utilisation de l'équation de Boltzmann sont décrites à l'annexe II. La difficulté de ce dessein vient principalement de la détermination des conditions frontières, puisque la discontinuité entre la paroi et le plasma ambiant doit être modélisée. Pour résoudre l'équation en tenant compte de cette discontinuité, le développement de Mott-Smith (1951) est utilisé. Cette méthode consiste à approximer la fonction de distribution $f(\mathbf{v})$ par une sommation de plusieurs fonctions de distribution, pondérées par un coefficient qui varie en fonction de la distance. Selon cette méthodologie, en faisant l'approximation d'un gaz monoatomique, Anisimov (1968) décrit l'ablation de la paroi de cette façon :

$$f(x, \mathbf{v}) = \alpha(x) f_a(\mathbf{w}) + [1 - \alpha(x)] f_b(\mathbf{w})$$

où

$$f_a(\mathbf{w}) = \begin{cases} n_a \left(\frac{m}{2\pi k_B T_a}\right)^{3/2} e^{-\frac{m w^2}{2\pi k_B T_a}} & \text{si } w_x > 0 \\ \beta f_b(\mathbf{w}) & \text{si } w_x < 0 \end{cases}$$

$$f_b(\mathbf{w}) = n_b \left(\frac{m}{2\pi k_B T_b}\right)^{3/2} e^{-m\frac{(w_x-u_b)^2+w_y^2+w_z^2}{2\pi k_B T_b}}$$

avec $u_b = M\sqrt{\frac{2k_B T_b}{m}}$, où M est le nombre de Mach, k_B la constante de Boltzman et m la masse atomique du gaz. La fonction $\alpha(x)$ est inconnue, mais possède les conditions frontières $\alpha(x_a) = 1$ et $\alpha(x_b) = 0$. La variable β représente la proportion de particules qui retournent vers la paroi, c'est-à-dire pour lesquelles $w_x < 0$. Afin d'obtenir les relations thermodynamiques, il suffit d'utiliser les invariants intégraux qui énoncent les lois de conservation des valeurs moyennes :

$C_L = \int w_x f(x, \mathbf{w}) d\mathbf{w}$ (Conservation de la quantité de mouvement du fluide)

$C_E = \int w_x^2 f(x, \mathbf{w}) d\mathbf{w}$ (Conservation de l'énergie cinétique des particules)

$C_Q = \int w_x w^2 f(x, \mathbf{w}) d\mathbf{w}$ (Conservation du flux d'énergie thermique)

Lorsqu'évaluée, ces intégrales ont donc la même valeur, peu importe l'endroit où elles sont calculées. Ainsi, en les évaluant en $x = x_a$ et en $x = x_b$ (voir annexe IV pour les détails), on obtient les équations de la couche de Knudsen :

$$\frac{n_a}{(\pi d_a)^{0.5}} = \frac{n_b}{(\pi d_b)^{0.5}} \beta \left[e^{-M^2} - M\sqrt{\pi}\,\mathrm{erfc}(M)\right] + 2 n_b u_b \tag{3.1}$$

$$\frac{n_a}{\pi d_o} = \frac{n_b}{\pi d_b} 2 \left[(1 + 2M^2)\left(1 - \frac{\beta}{2}\mathrm{erfc}(M)\right) + \frac{\beta M e^{-M^2}}{\sqrt{\pi}}\right] \tag{3.2}$$

$$\frac{n_a}{(\pi d_a)^{1.5}} = \frac{n_b}{(\pi d_b)^{1.5}} \left[M(M^2 + 2.5)\sqrt{\pi}\left(1 - \frac{\beta}{2}\mathrm{erfc}(M)\right) - (M^2 + 2)e^{-M^2}\right] \tag{3.3}$$

où :

$$\begin{aligned} d_a &= \frac{m}{2k_B T_a} \\ d_b &= \frac{m}{2k_B T_b} \\ M &= u_b d_b = \frac{V_b}{2k_B T_b/m} \end{aligned}$$

3.1.2 Couche hydrodynamique

Afin de faire la transition entre la couche de Knudsen et le plasma, on considère une mince couche, hors équilibre, où les collisions sont dominantes. Comme pour la couche de Knudsen, on ne tient compte que d'une seule espèce monoatomique, selon la supposition raisonnable que cette couche est mince et est constituée exclusivement de matière ablatée. On peut y appliquer les équations de conservation de la quantité de mouvement et d'énergie :

$$n_b u_b = n_c u_c \tag{3.4}$$

$$\frac{n_b k_B T_b}{2} + \frac{m n_b u_b^2}{2} = \frac{n_c k_B T_c}{2} + \frac{m n_c u_c^2}{2} \tag{3.5}$$

3.1.3 Le modèle

Les équations (3.1) à (3.5) permettent de définir un système à neuf inconnus $(T_a, T_b, T_c, n_a, n_b, n_c, u_b, u_c, \beta)$, laissant ainsi quatre variables indépendantes. Il est possible d'en éliminer une autre en considérant que la paroi est à l'équilibre, ce qui permet l'utilisation de l'équation de Clausius-Clapeyron :

$$P_a = n_a k_B T_a = P_{\text{crit}} e^{-T_{\text{crit}}/T_a}$$

Dans le développement de Keidar *et al.* (2001), ainsi que dans la présente utilisation, les variables indépendantes sont T_a, T_c et n_c, c'est-à-dire la température de la

paroi ainsi que la température et la densité du plasma. On peut donc calculer u_c si on connaît ces paramètres.

3.1.4 Validation

Ce modèle analytique de couche est validé par une simulation directe de type Monte-Carlo (DSMC) (Keidar *et al.* 2001). Il est évident que ce type de méthode est nécessairement plus précis et descriptif que les modèles analytiques régressifs, comme celui ici présenté. Cependant, l'énorme temps de calcul et les ressources informatiques gigantesques que requiert ce type de méthode les rendent inutilisables pour les modélisations complexes. Un modèle analytique correctement posé et adéquatement validé demeure une solution rapide, efficace et sûre. Les graphiques des figures (3.2) et (3.3), tirés directement de Keidar *et al.* (2001), démontrent la correspondance entre les deux méthodes.

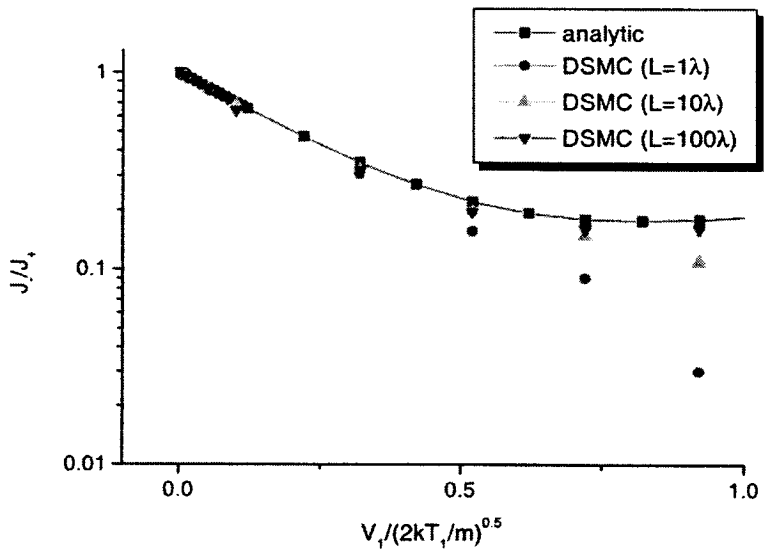


FIG. 3.2 *Comparaison entre le modèle analytique et des simulations de type DSMC : Pourcentage de particules qui retournent à la paroi en fonction de la vitesse (nombre de Mach) à la frontière de la couche, pour différentes distances de la paroi (figure tirée de Keidar et al. (2001)).*

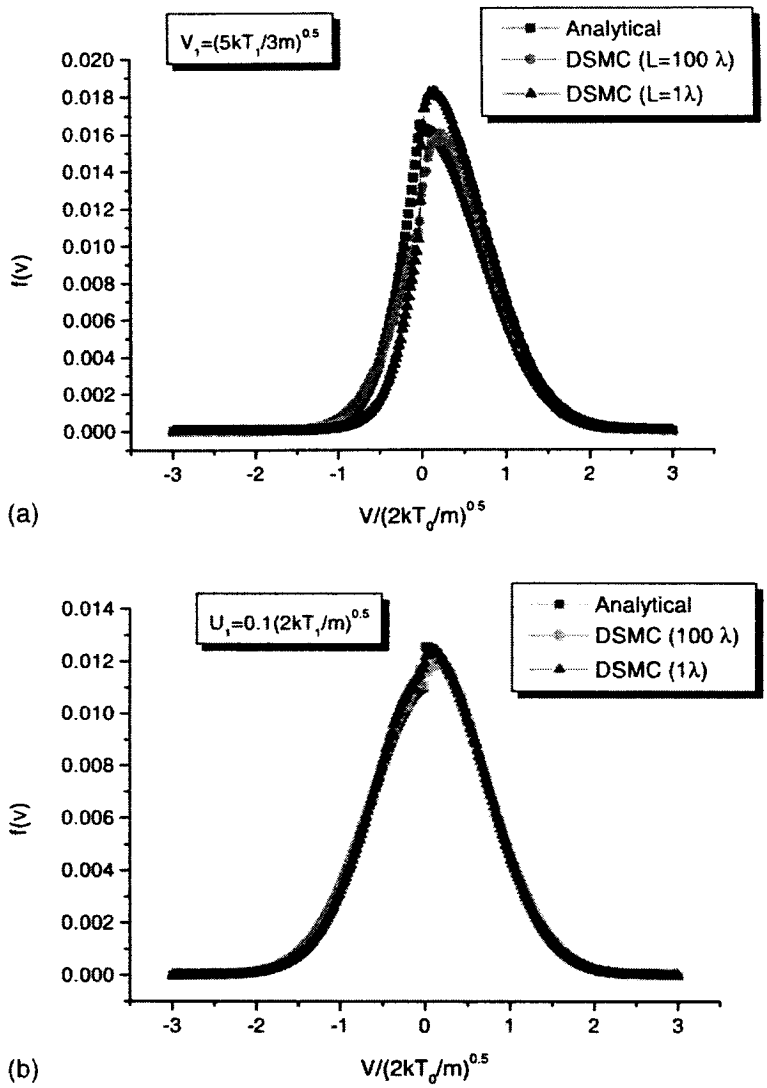


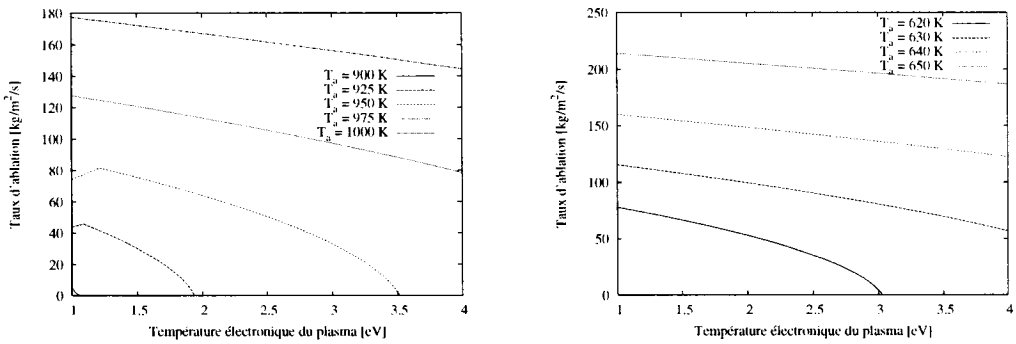
FIG. 3.3 *Comparaison entre le modèle analytique et des simulations de type DSMC : Variation de la fonction de distribution de vitesse des particules qui retournent à la paroi, en fonction de leur vitesse (nombre de Mach), pour différentes distances de la paroi (figures tirées de Keidar et al. (2001)). (a) Vitesse à la frontière :* $u_b = \sqrt{5k_BT_b/3m}$ *; (b) Vitesse à la frontière :* $u_b = 0.1\sqrt{2k_BT_b/m}$

3.1.5 Critiques et corrections

Il est à noter que l'article présentant les résultats du modèle comporte de nombreuses imprécisions et erreurs. Outre quelques mauvaises identifications de courbes, certaines valeurs utilisées n'ont pas les bonnes unités, menant ainsi à des températures hors normes. La première irrégularité est la valeur de la pression critique, $P_{\text{crit}} = 1.84 \times 10^{20}$ N/m^2, utilisée dans l'équation de Clausius-Clapeyron. L'utilisation de cette valeur a pour conséquence des températures de surface de l'ordre de 650 K, alors que les valeurs habituelles oscillent habituellement autour des 1000 K, tel qu'identifié par Ruchti et Niemeyer (1986). En utilisant la valeur de $P_{\text{crit}} = 1.84 \times 10^{15}$ N/m^2, valeur d'ailleurs utilisée par Mikellides (1999) (en citation dans l'article de Keidar *et al.* (2001)), on retrouve les valeurs justes. Il est cependant à noter que l'article de Keidar *et al.* (2001) prétend que la valeur de 650 K est conforme aux valeurs trouvées par Mikellides (1999) ; ce n'est cependant pas du tout le cas, puisque ce dernier obtient des températures avoisinant les 900 K (la figure 24 de Mikellides (1999)). La confusion vient peut-être de l'utilisation de la terminologie «température de décomposition» au lieu de l'habituelle «température de liquéfaction»... Malheureusement, comme la référence utilisée par Mikellides (1999) n'est pas publique, et que la laboratoire qui l'a produite n'existe plus, il n'a pas été possible de vérifier à la source.

Avec l'utilisation de la valeur de la température critique de Mikellides (1999), la représentation graphique de l'ablation et du nombre de Mach est nettement différente de celle présentée dans l'article de Keidar *et al.* (2001). Tout d'abord, sur l'intervalle de température de paroi (entre 600 et 650 K), aucune ablation effective n'a lieu. Comme on peut le voir à la figure (3.4a), l'ablation commence à apparaître à une température de paroi d'environ 900 K, ce qui est plus conforme aux données et observations de Ruchti et Niemeyer (1986). Sur la figure (3.4a), on peut voir les graphiques des valeurs du nombre de Mach M à la frontière b. À des fins comparatives, les graphiques sont comparés ceux de l'article de Keidar *et al.*

(2001).

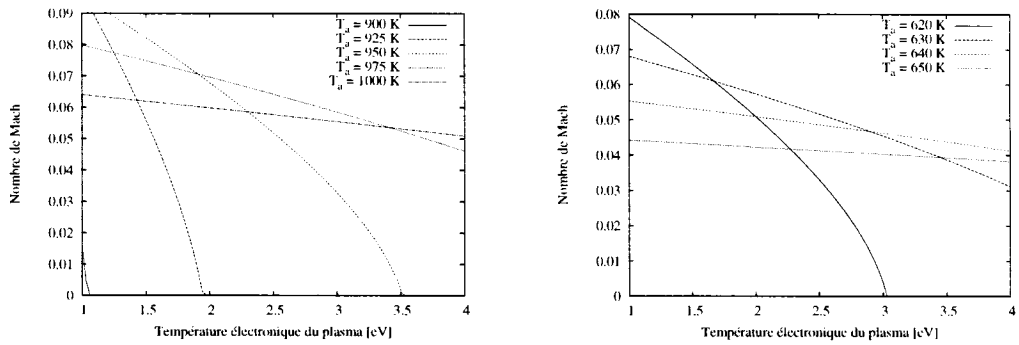


(a) *Pression critique* $P_{crit} = 1.84 \times 10^{15}$ *Pa*

(b) *Pression critique erronée* $P_{crit} = 1.84 \times 10^{20}$ *Pa*

FIG. 3.4 *Taux d'ablation en fonction de la température électronique du plasma* T_c, *à une densité constante* $n_c = 10^{24}\ m^{-3}$.

Le deuxième point de litige concerne la masse atomique m du PTFE , utilisée dans les équations de la couche de Knudsen. Tel que décrit dans l'article de Keidar *et al.* (2001), la théorie est basée sur l'utilisation d'un gaz monoatomique ; or, les gaz d'ablation du PTFE n'en sont certainement pas. Toujours selon Ruchti et Niemeyer (1986), ces gaz sont principalement constitués de C_2F_4 et de CF_2, ce qui, par atome, donne une masse moyenne de $2.76798447 \times 10^{-26}$. Or, la valeur utilisée par Keidar *et al.* (2001) est plutôt de $2.37143267 \times 10^{-26}$, ce qui revient à diviser la masse de la molécule de C_2F_4 par 7, au lieu de 6 (le nombre d'atomes dans la molécule). Un récent article de Zaghloul (2004) règle ce problème en le contournant ; au lieu d'utiliser une valeur moyenne sujette à interprétation, les équations sont adaptées pour tenir compte de la nature moléculaire du gaz d'ablation. La théorie primée propose l'utilisation d'une masse moyenne moléculaire qui est fonction de la température. Ainsi, la masse m a une valeur différente en fonction de la



(a) *Pression critique* $P_{crit} = 1.84 \times 10^{15}$ *Pa*

(b) *Pression critique erronée* $P_{crit} = 1.84 \times 10^{20}$ *Pa*

FIG. 3.5 *Nombre de Mach à l'interface entre la couche de Knudsen et la couche hors équilibre, en fonction de la température électronique du plasma* T_c*, à une densité constante* $n_c = 10^{24}\ m^{-3}$.

frontière où elle est considérée. De plus, les équations permettent l'utilisation d'un γ (rapport des chaleurs spécifiques) lié au gaz d'ablation en cause, contrairement à Keidar *et al.* (2001) qui le pose égal à 5/3. De façon accessoire, l'article propose aussi une modification aux équations qui permet de prendre en considération les degrés de liberté interne des molécules polyatomiques, phénomène éliminé par la simplification monoatomique de la théorie de Keidar *et al.* (2001) [1].

3.2 Distribution de chaleur dans la paroi

Tel que mentionné précédemment, le modèle présenté utilise la température de la paroi comme paramètre de calcul, ce qui n'est d'aucune utilité dans le cas présent puisque la température de la paroi est justement une des valeurs que l'on

[1] Bien que ces précisions auraient aisément pu être intégrées dans la présente thèse, le temps n'a pas permis de le faire.

cherche à obtenir. Pour ce faire, il faut donc coupler ces équations à un algorithme de transfert et de dispersion de chaleur, calculée à l'intérieur de la paroi.

La température à l'intérieur de la paroi se calcule en résolvant l'équation de la chaleur à une dimension. Bien que la formulation soit simple, l'application dans le cas présent est tout autre. La complication vient principalement du fait que la paroi passe par les trois phases en un temps très court (problème de Stefan). Il faut donc que les équations tiennent compte des changements de phase, en plus d'être résolues sur une frontière mobile (le front d'ablation). Afin d'alléger la notation et de simplifier le traitement des changements de phase, c'est l'équation de la conduction sous sa forme enthalpique qui est résolue :

$$\frac{\partial H}{\partial t} - U\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{\kappa}{\rho}\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{\kappa}{\rho}\frac{1}{r}\frac{\partial T}{\partial r}$$

où H est l'enthalpie, t le temps, U la vitesse du front d'ablation, κ la conductivité thermique, ρ la densité et r la distance radiale dans la paroi. Les conditions de liaison entre la phase solide et la phase liquide sont

$$\begin{aligned} T = H/c_P \quad &\text{lorsque} \quad H < c_P T_L \\ T = T_L \quad &\text{lorsque} \quad c_P T_L \leq H \leq c_P T_L + L_L \\ T = (H - L_L)/c_{Pl} \quad &\text{lorsque} \quad H > c_P T_L + L_L \end{aligned} \tag{3.6}$$

où L_L est la chaleur latente de liquéfaction, T_L la température de liquéfaction et c_P la chaleur spécifique à pression constante. Il est à noter que ces conditions sont les mêmes que celles utilisées dans l'élaboration de la théorie d'ablation, au chapitre 1, c'est-à-dire les équations (III.2). La discrétisation des équations est effectuée selon une approche différences-finies explicite (Ozisik 1994), centrées en espace et

décentrées en temps (figure (3.6)) :

$$\begin{aligned} H_j^{t+1} &= H_j^t + U^t \eta (H_{j+1}^t - H_{j-1}^t) \\ &\quad + \frac{2\kappa}{\rho} \eta \left(\frac{T_{j+1}^t - T_j^t}{\Delta r_{j+1}} - \frac{T_j^t - T_{j-1}^t}{\Delta r_j} \right) + \frac{\kappa}{\rho r_j} \eta (T_{j+1}^t - T_{j-1}^t) \end{aligned}$$

où $\eta = \frac{\Delta t}{\Delta r_j + \Delta r_{j+1}}$. À la frontière, l'équation devient :

$$H_0^{t+1} = H_0^t + U^t c_P \Delta t \left. \frac{\partial T^t}{\partial r} \right|_0 + \frac{2\kappa}{\rho} \frac{\Delta t}{\Delta r_1} \left(\frac{T_1^t - T_0^t}{\Delta r_1} - \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_0 \right) + \frac{\kappa}{\rho r_j} \Delta t \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_0$$

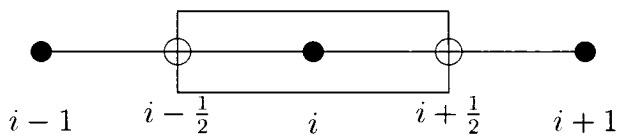


FIG. 3.6 *Discrétisation en espace du schéma de type différences-finies explicite.*

La conditon frontière à la paroi est :

$$-\kappa \left. \frac{\partial T}{\partial r} \right|_0 = Q_{\text{rad}} - \rho U L_V \tag{3.7}$$

où L_V est la chaleur latente d'évaporation. Pour ce qui est de la condition frontière à l'infini, c'est-à-dire à l'autre extrémité de la paroi, on pose tout simplement :

$$T_\infty = T_{\text{init}}$$

Il est à noter que toute l'énergie radiative incidente est considérée comme étant complètement absorbée à la paroi, et ne pénètre donc pas le milieu. Il serait possible de tenir compte de tels phénomènes en appliquant un critère de pénétration, comme le font Osawa et Yoshioka (2003) avec la loi de Beer-Lambert. Cependant,

dans l'optique de l'utilisation du modèle, ce genre de précision est d'une utilité moindre puisque les fabriquants de disjoncteurs cherchent justement à éliminer la pénétration interne de la radiation (en dopant le PTFE, par exemple), pour éviter les explosions de phase (voir à l'annexe I pour les détails).

Malgré le fait que l'utilisation de la forme enthalpique de l'équation simplifie les calculs, une certaine imprécision est générée lors de la transformation de l'enthalpie en température. Puisque les relations entre la température et l'enthalpie sont non linéaires (équations (3.7)), on constate la formation de plateaux oscillants autour de la solution réelle, créés par la nature discrète du domaine de calcul (figure (3.7)). Bien que les résultats ne soient pas précis, ils demeurent tout de même acceptables. Une solution possible à ce problème est de rapprocher les points de discrétisation, ce qui réduit l'amplitude de l'oscillation. Voller et Cross (1981) ont aussi développé une technique qui permet de prédire les points de la courbe numérique oscillante qui sont directement sur la solution. Brièvement, cette méthode consiste à ajuster le pas de temps pour que l'endroit où la température atteint le point de liquéfaction T_L ait une enthalpie correspondant à $c_P T_L + L_L/2$. De cette façon, la température de liquéfaction est toujours directement positionnée sur un point du maillage. Cette façon de faire permet une discrétisation en espace plus grande, ce qui réduit le nombre de points à calculer et augmente le pas de temps, et ce, tout en gardant une excellente précision. Bien que cette méthode ait initialement été implantée, elle a été finalement rejetée pour des raisons évoquées plus loin.

3.3 Couplage

Le couplage entre les deux algorithmes (modèle de couche et diffusion dans la paroi) n'est pas sans difficulté. Dès l'instant où la paroi atteint la température d'évaporation, le référentiel de calcul se déplace à la vitesse d'ablation. Ce déplacement doit donc se faire à un pas de temps réduit, pour éviter, une fois de plus, les oscillations dans le calcul de la température de la paroi. En effet, lorsque la paroi

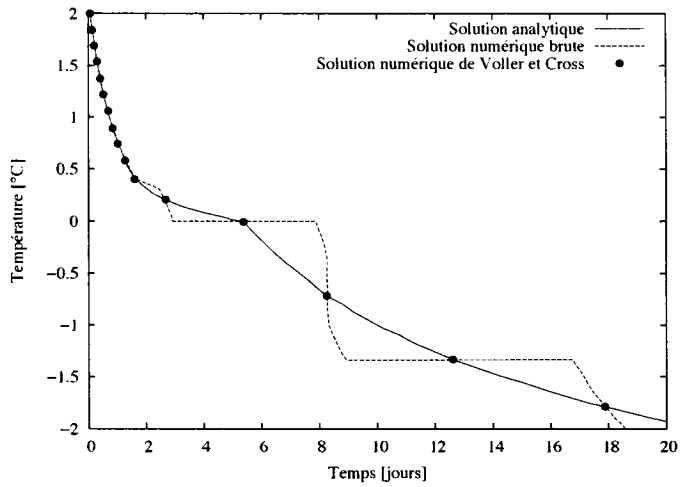


FIG. 3.7 *Température à la surface d'un bloc de glace se liquéfiant (tirée de (Voller et Cross 1981)) : différentes méthodes de calcul.*

s'évapore, le référentiel se déplace pour suivre la frontière ; à ce nouvel emplacement, la température n'est pas encore au niveau d'évaporation, ce qui fait en sorte que, pendant un court laps de temps, l'énergie incidente sert à ramener la paroi à la température d'évaporation. Or, comme on le voit dans l'équation (3.7), cette énergie est soudainement plus grande puisque U devient presque négligeable. Si le pas de temps n'est pas adéquatement choisi, d'énormes oscillations peuvent apparaître. Notons cependant que malgré ces oscillations, la solution demeure valide, en moyenne, tel qu'illustré à la figure (3.8). Bref, pour éviter que le mouvement soit trop saccadé, il appert que la discrétisation en espace et le pas de temps doivent être les plus petits possible.

Tel que stipulé à la section 1.5, la vitesse d'ablation devient constante après un certain temps. Une fois cet état transitoire atteint, la température cesse de changer. En fonction du domaine spatial considéré, il est possible que des points situés suffisamment loin du front d'ablation ne voient jamais leur valeur changer. Pour

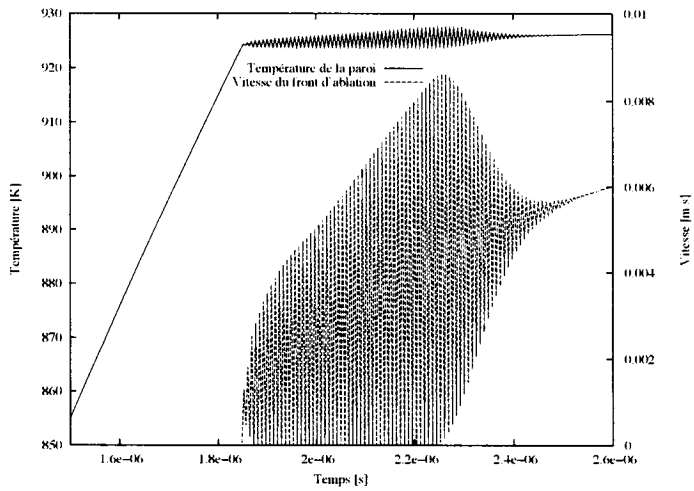


FIG. 3.8 *Oscillations causées par un pas de temps trop petit ou une discrétisation trop grande.*

les mêmes raisons, pour des points légèrement plus rapprochés, le changement est tellement mineur qu'il ne requiert en rien le calcul précis et exhaustif d'une forte discrétisation. Il est donc préférable, pour réduire le temps de calcul, de prévoir le domaine d'observation le plus petit possible. Ceci étant établit, et de par l'explication du paragraphe précédent, il est tout de même impératif de garder l'espace entre les points le plus rapproché possible, tout près de la frontière.

Le choix d'une discrétisation logarithmique en espace vient régler simplement ce double problème. Ainsi, la distance entre les points près de la frontière est très petite, alors qu'à l'extrémité de la paroi, elle est très grande (toute proportion gardée, évidemment...). De plus, le nombre de points peut être considérablement réduit, sans aucune perte de précision dans les calculs. La technique permet ainsi d'établir le calcul sur un grand domaine, justifiant de poser une condition frontière à l'infini.

Comme la discrétisation est suffisamment petite pour que l'oscillation décrite

à la sous-section précédente soit négligeable, il n'est pas nécessaire d'implanter la technique d'évaluation de points valides développée par Voller et Cross (1981), trop coûteuse en temps de calcul. De plus, le fait que le pas de temps soit réévalué ajoute des imprécisions supplémentaires, surtout lorsque la radiation est faible et que la paroi est chauffée lentement. De toute façon, la méthode de Voller et Cross (1981) précise les valeurs de la température de la paroi alors qu'elle est un peu plus élevée que le point de liquéfaction ; or, à cette valeur, l'ablation est plus que négligeable. Comme c'est l'ablation qui importe dans le développement ici présenté, il est donc inutile d'en tenir compte.

3.4 Validations et résultats

3.4.1 Comparaison avec l'ancien modèle

Tel que démontré au chapitre 1, la supposition d'un front d'ablation se déplaçant à vitesse constante permet de simplifier grandement les équations de couplage à la paroi. Il appert que l'algorithme couplé décrit ci-dessus doit fournir les mêmes résultats lorsque la vitesse d'ablation est convergée et que la solution en température est constante. Cette méthode théorique consiste donc en une excellente façon de valider l'algorithme couplé.

Afin de permettre une comparaison directe, la méthode de calcul de la température à la paroi décrite à la section 2.4 est utilisée. La température et la pression du plasma sont considérées fixes ($T_c = 10000$ K et $P_c = 3$ atm), de même que la radiation incidente ($Q_{rad} = 4 \times 10^8$ W/m^2). La paroi est considérée comme faite de PTFE ; les propriétés thermiques, tirées de Mikellides (1999), Ruchti et Niemeyer (1986) et Godin (1998), sont données au tableau (3.1).

La figure (3.9) illustre la valeur de la vitesse du front d'ablation. On y voit que la vitesse de l'algorithme couplé converge assez rapidement avec celle de l'approximation stationnaire. On note aussi une sous-évaluation de la vitesse d'ablation venant

TAB. 3.1 *Propriétés du PTFE*

Température de liquéfaction	T_L	592 K
Chaleur latente de liquéfaction	L_L	60×10^3 J/kg
Chaleur latente de vaporisation	L_V	1.725×10^6 J/kg
Conductivité thermique	κ	0.344 W/m/K
Chaleur spécifique	c_P	1250 J/kg/K
Densité du solide	ρ	2150 kg/m^3

du fait que la température de surface, et donc l'énergie nécessaire à la chauffer, est fixée arbitrairement à 1000 K. La figure (3.10) présente le pourcentage de différence entre les deux vitesses, selon la méthode de calcul.

La figure (3.11) illustre la quantité de matière ablatée pour les deux méthodes de calcul, de même que pour l'ancienne méthode où la température est fixée. On note aussi une sous-évaluation lors de l'utilisation de cette dernière. On remarque aussi que les courbes sont parallèles, ce qui démontre un taux d'ablation identique à partir du moment où l'état stationnaire est atteint. L'évolution de l'érosion de la surface est présentée à la figure (3.12) ; on en retient qu'après une milliseconde d'irradiation, près d'un dixième de millimètre de la paroi est évaporée. Plus spécifiquement, on voit sur la figure (3.13) les tout premiers moments de l'ablation ; la technique couplée permet de tenir compte du bref moment ou l'ablation n'a pas lieu. La figure (3.14) illustre la température de la surface pour toute la durée de la simulation, alors que la figure (3.15) présente les premiers instants, où la transition entre la phase solide et l'ablation est faite. On y note le point où la paroi se liquéfie, ainsi que celui où l'ablation devient substantielle. Le dernier de cette série de graphiques présente la distribution de la température à l'intérieur de la paroi. Les phases solide et liquide sont illustrées, séparées par une ligne indiquant la température de 592 K. On note aussi que, bien que le domaine de calcul soit de 5×10^{-5} m, seulement la moitié est affectée par la radiation. On voit donc clairement l'intérêt de la discrétisation logarithmique, puisque seulement 3 points sont utilisés dans

cette région, alors que 27 le sont dans l'autre.

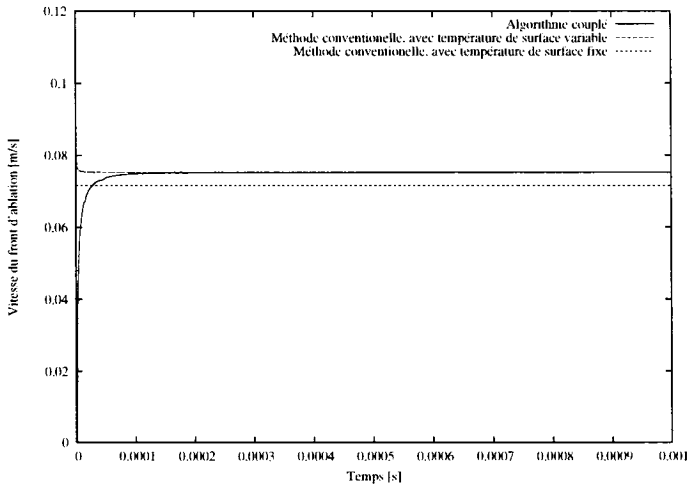


FIG. 3.9 *Vitesse du front d'ablation en fonction du temps, pour les deux méthodes de calcul.*

Il est à souligner que de l'ablation est observée pour toutes températures, dès l'instant où la paroi atteint le point de liquéfaction. Évidemment, cette valeur est tout à fait négligeable (de l'ordre de 10^{-14} kg/m^2) jusqu'à une certaine température, où l'ablation dite substantielle est constatée (de l'ordre de 10^{-2} kg/m^2). C'est ce point qu'on qualifie de «température de vaporisation effective», ou tout simplement «température de vaporisation». La figure (3.17) illustre ce phénomène ; on voit clairement que lorsque la température atteint 927 K, l'ablation apparaît brutalement ; auparavant, bien que présente, elle est totalement négligeable. C'est lors de ce passage que des oscillations peuvent apparaître si le pas de temps (ou le pas de discrétisation en espace) est trop grand.

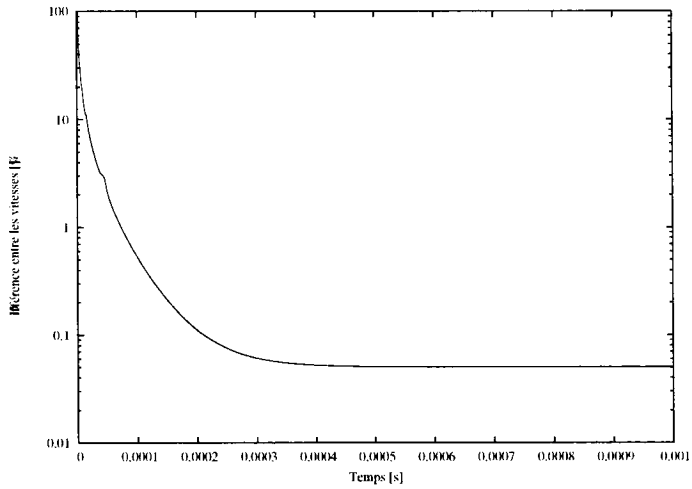


FIG. 3.10 *Pourcentage de la différence de la vitesse du front d'ablation pour les deux techniques de calcul.*

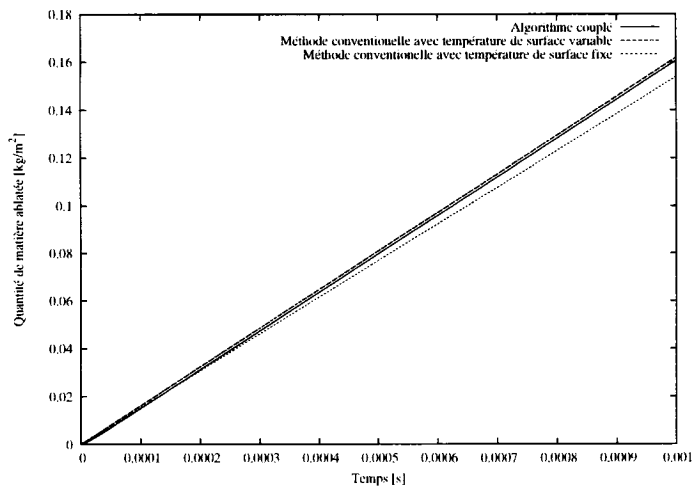


FIG. 3.11 *Évolution temporelle de la quantité de matière ablatée, pour les deux méthodes de calcul.*

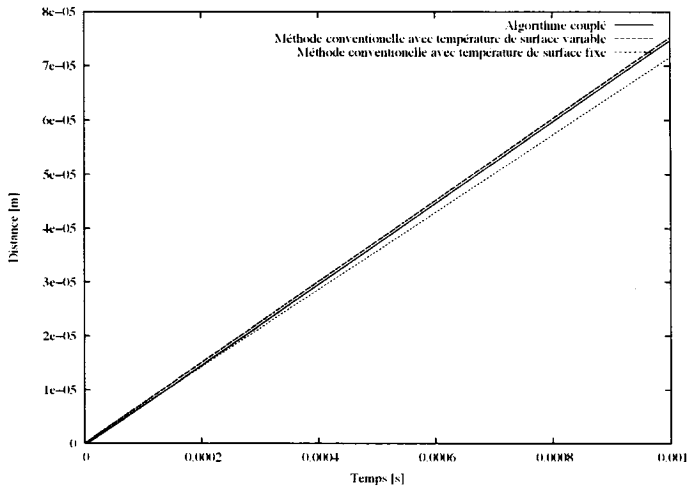


FIG. 3.12 *Évolution temporelle de l'érosion de la surface des suites de l'ablation, pour les deux méthodes de calcul.*

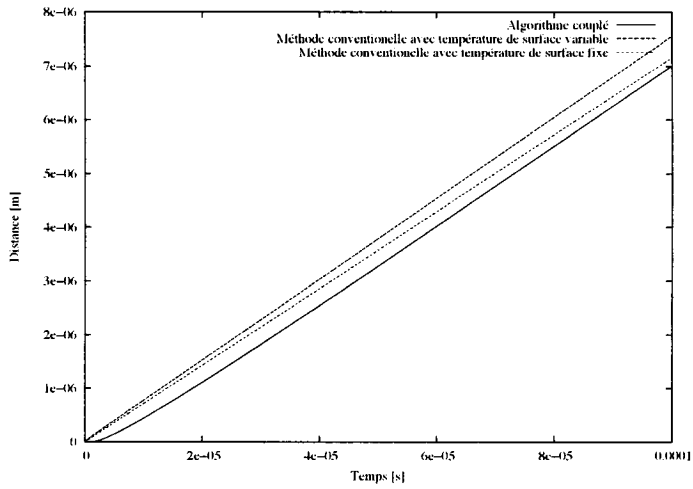


FIG. 3.13 *Évolution temporelle de l'érosion de la surface des suites de l'ablation, pour les deux méthodes de calcul; emphase sur les premiers moments du calcul.*

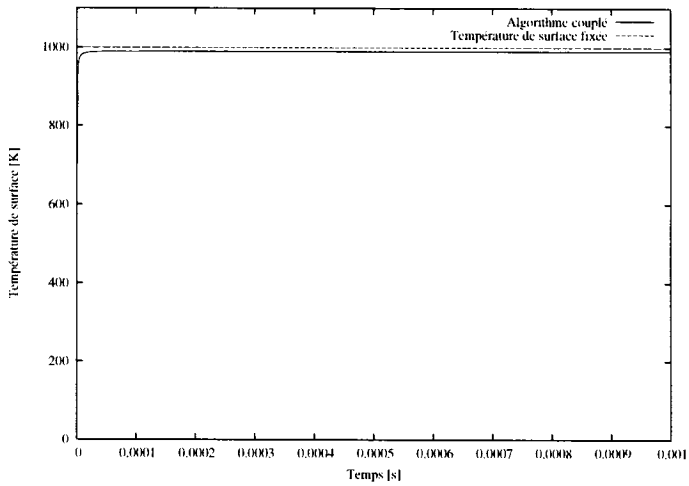


FIG. 3.14 *Évolution temporelle de la température de la surface.*

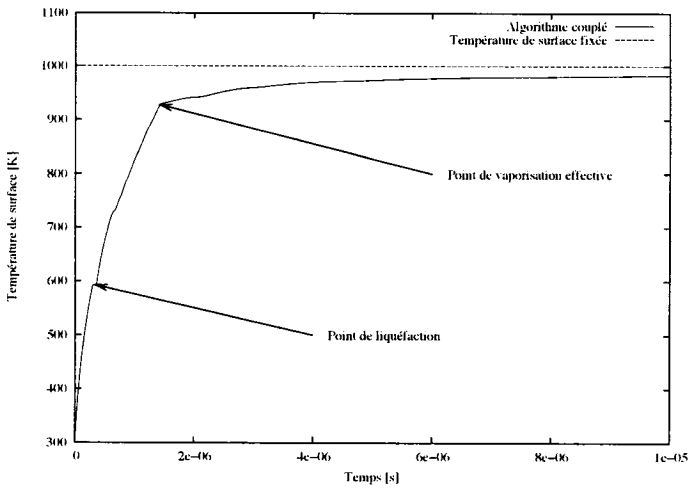


FIG. 3.15 *Évolution temporelle de la température de la surface ; emphase sur les premiers moments du calcul.*

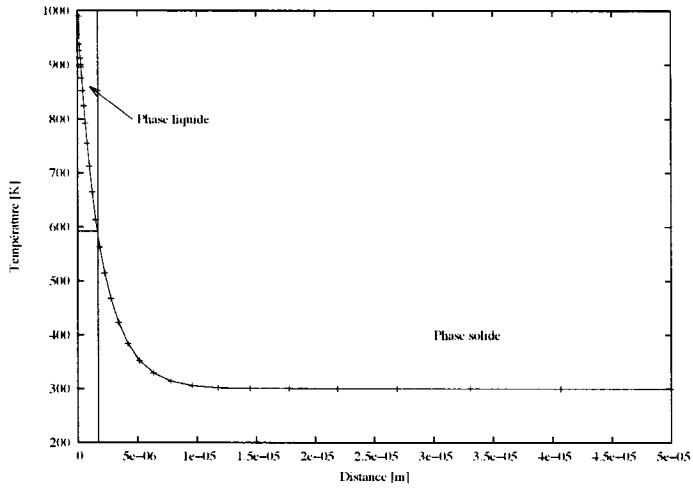


FIG. 3.16 *Distribution de la température à l'intérieur de la paroi.*

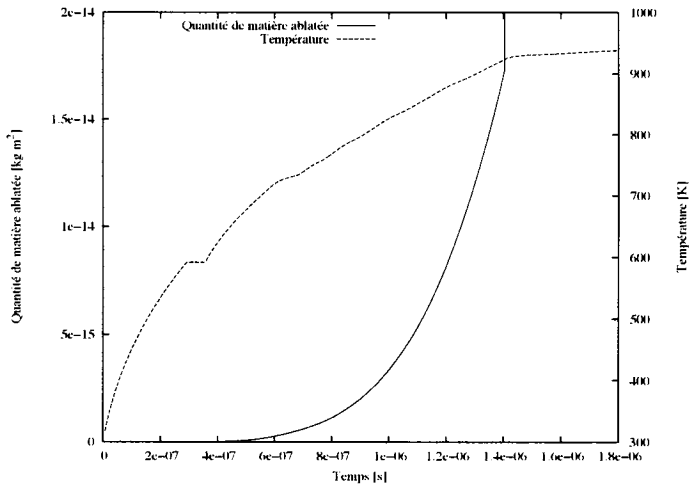


FIG. 3.17 *Distribution de la température à l'intérieur de la paroi.*

3.4.2 Conditions d'utilisation du nouveau modèle

À la lumière de ces résultats, on peut mieux cerner la validité et l'utilité du modèle. On peut observer une nette différence avec l'ancien modèle, dans les premiers instant du processus. De toute évidence, ce modèle couplé est peu utile pour une utilisation en régime stationnaire. Le nouveau modèle est d'autant plus intéressant si la radiation est faible, puisque la paroi prendra plus de temps à chauffer, et atteindra donc l'état stationnaire moins rapidement. C'est à cause de cette dernière observation que le modèle est d'une certaine utilité pour la simulation de disjoncteurs. Puisque le courant est alternatif, il est tout à fait possible que les premiers instants d'ablation suivent un passage au courant zéro, ce qui se traduit donc par une faible radiation initiale. Afin de constater directement ce processus, le modèle est intégré à MC^3 afin de simuler un arc électrique généré par un courant alternatif. Pour ce faire, la paroi est discrétisée sur une mince épaisseur. La distribution de température est calculée de façon unidimensionnelle en tenant compte des conditions à la cellule de maillage adjacente (figure (3.18)).

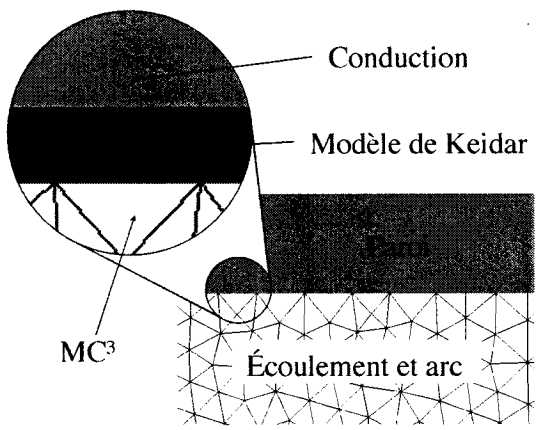


FIG. 3.18 *Intégration du modèle couplé dans le logiciel MC^3*

La géométrie consiste en un tube de 9.55 mm de diamètre et de 4 cm de long. Un arc électrique généré par un courant alternatif de 60 Hz dont le maximum est

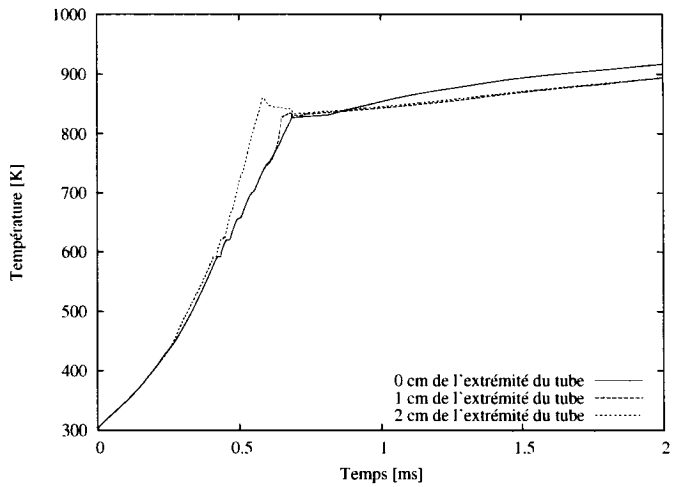


FIG. 3.19 *Température à la paroi à différents endroits du tube.*

de 19 000 A traverse le tube. Le graphique de la figure (3.19) présente l'évolution de la température pour trois points sur la surface interne du cylindre. On y voit que l'ablation substantielle apparaît entre 0.5 et 0.75 ms. Comme un demi-cycle de courant a une durée de 8.33 ms, cette partie n'est donc pas négligeable. La figure (3.20) présente le taux d'ablation ponctuelle en fonction du temps, alors que la figure (3.21) illustre l'usure de la paroi. La valeur de la température à la paroi, calculée par MC^3 et utilisée par le modèle, est présentée à la figures (3.22) ; on y constate une forte augmentation lorsque l'ablation apparaît et que les vapeurs de PTFE ($T \approx$3500 K) sont injectées. Finalement, le graphique de la figure (3.23) compare la température à la paroi calculée par la méthode décrite à la section 3.20 et celle calculée par le présent modèle ; on y note clairement une sous évaluation lorsque l'ablation apparaît. De plus, dans les premiers instants, la surévaluation de cette température fausse la quantité de matière ablatée, qui, de toutes façons, devrait être nulle.

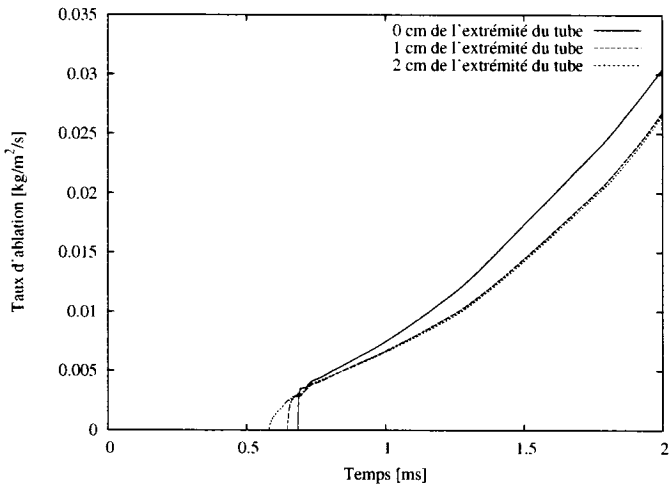


FIG. 3.20 *Taux d'ablation à différents endroits du tube.*

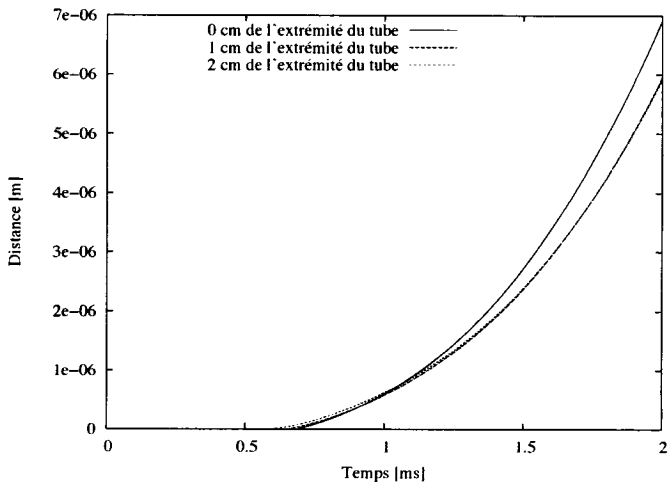


FIG. 3.21 *Usure du tube à différents endroits.*

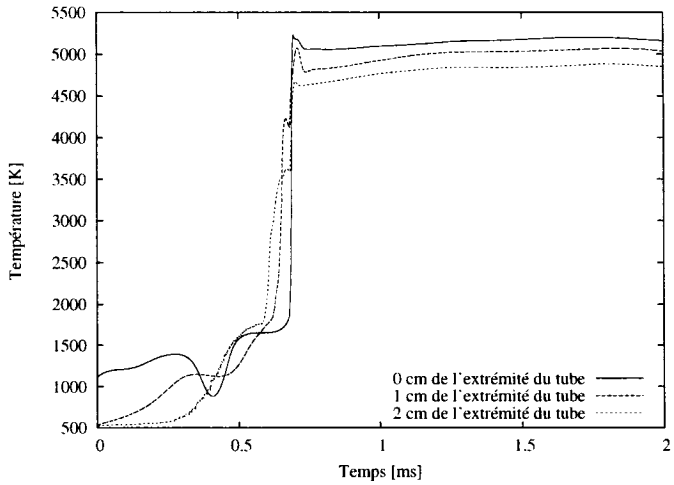


FIG. 3.22 *Historique de la température de la couche plasma.*

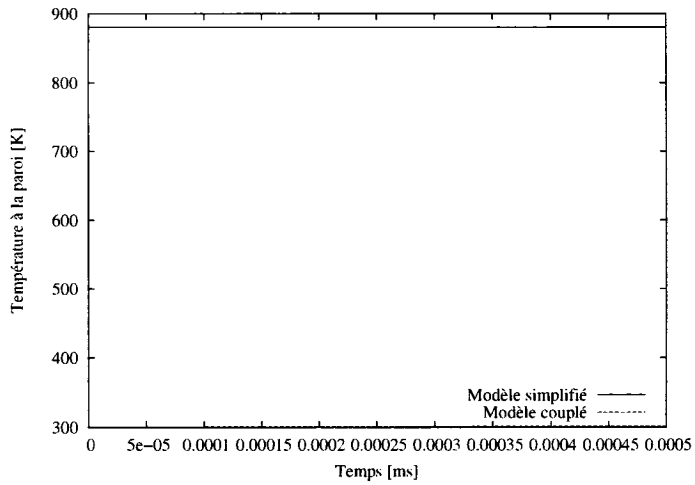


FIG. 3.23 *Température à la paroi calculée avec le modèle simplifié (section 2.4) et calculée avec le modèle couplé.*

Ces résultats démontrent l'utilité de la méthode dans des cas précis. Cependant, pour une utilisation courante, le grand temps de calcul requis pour faire le calcul des couches, de même que la distribution de température dans la paroi vient ajouter un bémol quant à son utilisation. Comme on a pu le voir à la section précédente, après un certain temps, le modèle simplifié suffit amplement au calcul d'ablation ; il conviendrait donc d'ajouter à MC^3 un modèle hybride qui tient initialement compte des effets transitoires, mais qui utilise éventuellement le modèle simplifié.

CONCLUSION

Les travaux ici présentés ont pour but général d'améliorer la simulation des disjoncteurs. Pour ce faire, deux ajouts ont été faits au logiciel de simulation MC^3. Tout d'abord, un nouveau schéma de résolution, dérivé de celui de Roe (1981), a été établi. L'apport principal du schéma est la prise en considération de plusieurs espèces de gaz lors de la résolution. Dans un contexte de simulation de disjoncteurs, l'importance de la prise en considération de ces gaz est primordiale, puisque l'arc électrique présent a pour effet d'ablater la paroi, et d'ainsi modifier la composition chimique de la chambre de coupure. Dans un premier temps, le schéma a été développé à une dimension, pour un nombre quelconque d'espèces. Des validations avec les résultats analytiques et d'autres schémas du même genre ont permis de constater sa validité, sa robustesse et sa versatilité. Le schéma a ensuite été adapté pour des simulations axisymétriques, afin d'être inclus dans le logiciel MC^3. D'autres validations analytiques ont pu être effectuées, de même que des comparaisons expérimentales. Plus spécifiquement, la simulation d'une petite bulle d'hélium traversée par un choc a pu être effectuée, et comparée avec la réalité ; les résultats sont d'une étonnante similitude. Le nouveau schéma permet maintenant à MC^3 de tenir compte des nouveaux gaz qui sont injectés dans le disjoncteur lors de l'ablation. Ainsi, des validations avec les données expérimentales de Ruchti et Niemeyer (1986) et le disjoncteur simplifié de Lewis (1987) ont permis de constater une nette amélioration quant à la précision des simulations.

En seconde partie, l'algorithme d'ablation de MC^3 a été modifié pour améliorer la modélisation temporelle et spatiale des parois en présence de l'arc électrique. Pour ce faire, un modèle issu d'une discipline connexe a été vérifié et adapté pour la problématique présente. Ce modèle de couche, développé par Keidar *et al.* (2001) permet de lier l'ablation au plasma de l'arc et à la paroi. Afin de rendre le modèle plus pratique, celui-ci a été couplé à un algorithme de calcul de la température dans

la paroi. Avec cet ajout, il est maintenant possible de connaître la distribution de température dans la paroi, et de calculer de façon beaucoup plus précise la quantité de matière qui est injectée dans le disjoncteur. De plus, le taux d'érosion de la paroi peut aussi être connu, ce qui permet de juger de la dégradation du disjoncteur après chaque utilisation. Le modèle couplé à été validé avec l'ancien modèle d'ablation, qui lui était comparé à des données expérimentales. Il est cependant à noter que l'intégration du modèle couplé dans MC^3 augmente de façon significative le temps de calcul. Sans optimisation du code, la simulation sur de longues périodes de temps de géométries à maillage raffiné n'est malheureusement pas envisageable. Des analyses ponctuelles, par exemple pour la calibration, sont toutefois possibles.

Les nouveaux développements décrits dans le présent document auront à court terme une utilité certaine pour le développement de disjoncteurs haute-tension plus efficaces. La possibilité de tester directement l'effet qu'auront divers matériaux d'ablation permettra la conception de buses adaptées selon les besoins. De plus, la possibilité de simuler différents mélanges de gaz d'extinction pourra permettre d'effectuer des tests préliminaires sur d'éventuels gaz de remplacement, le SF_6 étant maintenant homologué comme gaz à effet de serre.

Ces nouveaux ajouts ouvrent aussi la porte à de nombreuses améliorations au logiciel MC^3 et à la simulation numérique de disjoncteurs. Par exemple, l'algorithme d'ablation pourra être utiliser pour modéliser l'usure de la paroi. Ainsi, il sera possible de visuellement constater l'effet de l'ablation à différents endroits de la paroi, et de prédire l'efficacité du disjoncteur après plusieurs utilisations. Le présent algorithme pourra aussi être couplé au modèle d'électrodes développé par Maruzewski *et al.* (2002) afin de calculer l'usure de celles-ci. Notons finalement qu'à très court terme, le modèle d'ablation pourra être amélioré en y incorporant les modifications que fait Zaghloul (2004) au modèle de Keidar *et al.* (2001), de même qu'une loi qui tient compte de la pénétration de la radiation à l'intérieur de la paroi, par exemple celle de Beer-Lambert.

RÉFÉRENCES

ABGRALL, R. 1994. «How to prevent pressure oscillation in multicomponent flow calculations : a quasi conservative approach». Rapport de recherche 2372, INRIA. Programme 6.

ANISIMOV, S. I. 1968. «Vaporization of metal absorbing laser radiation». *Soviet Phys.-JETP*, 27, 182.

BARBANTE, P. F., ABEELE, D. V., BOTTIN, B. ET DEGREZ, G. 1999. «Numerical simulation of high-temperature non-equilibrium flows at the von Karman Institute». *Proceedings of the First Joint French-German Symposium on Simulation of Atmospheric Entries by Means of Ground Test Facilities*. Stuttgart, Germany, VKI RP 2000–03.

BEILIS, I. I. 1985. «Parameters of the Kinetic Layer of Arc-Discharge Cathode Region». *IEEE Transaction on plasma science*, 13, 288–290.

CFD RESEARCH CORPORATION 2005. «CFD Research Corp. (CFDRC) - Engineering Simulations Software, Services and R&D». http ://www.cfdrc.com.

DELCROIX, J.-L. ET BERS, A. 1994. *Physique des plasmas*, vol. 2. Éditions du CNRS.

DOWDEN, J. M. 2001. *The Mathematics of Thermal Modelling*. Chapman & Hall/CRC.

EBY, S., TRÉPANIER, J.-Y. ET ZHANG, X. 1998. «Modelling radiative transfer in SF_6 circuit-breaker arcs with the P-1 approximation». *Journal of Physics D : Applied Physics*, 31, 1578–88.

EBY, S. D. ET TRÉPANIER, J.-Y. 1998. «MC^3 version 4.3, User's Guide». Rapport technique, CERCA et École Polytechnique de Montréal.

FEDKIW, R. P., LIU, X. ET OSHER, S. 1997. «A General Technique for Eliminating Spurious Oscillations in Conservative Schemes for Multiphase and Multispecies Euler Equations». Rapport technique 27, UCLA CAM.

GLAISTER, P. 1988. «An approximate Linearised Solver for the Euler Equations for real Gases». *Journal of Computational Physics*, 74, 382–408.

GODIN, D. 1998. *Calcul de Composition Chimique de Plasmas à l'équilibre thermodynamique : Application à la modélisation de l'ablation dans les disjoncteurs.* Mémoire de maîtrise, École Polytechnique de Montréal.

GODIN, D. ET TRÉPANIER, J.-Y. 1999. «An efficient Method for the Computation of Equilibrium in Gaseous Mixtures». *14th Int. Symp. on Plasma Chemistry.* Prague, Czech Republic.

GODIN, D., TRÉPANIER, J.-Y., REGGIO, M., ZHANG, X. ET CAMARERO, R. 2000. «Modelling and Simulation of Nozzle Ablation in High-Voltage Circuit-Breaker». *Journal of Physics D; Applied Physics.*

HASS, J. ET STURTEVANT, B. 1987. «Interaction of weak shock waves with cylindrical and spherical gas inhomogenities». *J. Fluid Mech.*, 181, 41–76.

HIRSCH, C. 1990. *Numerical Computation of Internal and External Flows*, vol. 1 : Fundamentals of Numerical Discretization. John Wiley & Sons.

KEIDAR, M., BOYD, I. D. ET BEILIS, I. I. 2001a. «On the model of Teflon ablation in an ablation-controlled discharge». *Journal of Physics D : Applied Physics*, 34, 1675–1677.

KEIDAR, M., FAN, J. ET BOYD, I. D. 2001b. «Vaporization of heated materials into discharge plasmas». *Journal of Applied Physics*, 89, 3095–3098.

LARROUTUROU, B. 1990. «Recent Progress in Reactive Flow Computations». Rapport technique, CERMICS, INRIA, Sophiq-Antipolis, 06560 Valbonne, France.

LEWIS, E. 1987. *Thermal properties of a* SF_6 *circuit-breaker arc during the current zero period.* Thèse de doctorat, The University of Liverpool.

LIEBERMANN, R. W. ET LOWKE, J. 1976. «Radiation emission coefficients for sulfur hexafluoride arc plasma». *Quant. Spectros. Radiat. Transfer.*, 16, 253–264.

LIOU, M. S. 1996. «A sequel to AUSM : AUSM+». *J. of Comp. Physicis*, 129, 364–382.

MARTIN, A., REGGIO, M. ET TRÉPANIER, J.-Y. 2001. «Simulation of inviscid multi-species plasma flow». *9th Annual Conference of the CFD Society of Canada.* University of Waterloo, Waterloo, Canada, vol. 1, 459–464.

MARTIN, A., REGGIO, M. ET TRÉPANIER, J.-Y. 2002. «Simulation of Inviscid Multi-Species Plasma Flow». *Computational Technologies for Fluid/Thermal/Structural/Chemical Systems with Industrial Applications, Volume 1.* Pressure and Piping Divison, ASME, vol. PVP-Vol. 448-1, 147–154.

MARUZEWSKI, P., MARTIN, A., REGGIO, M. ET TRÉPANIER, J.-Y. 2002. «Simulation of arc-electrode interaction using sheath modelling in SF_6 circuit-breakers». *Journal of Physics D : Applied Physics*, 35, 891–899.

MEHLMAN, G. 1991. «A Riemann Solver That Preserves Positivity for Mixtures of Real Gases in Thermal and Chemeical Non-Equilibrium». Rapport technique, Ecole Polytechnique, Centre de Mathématiques Appliquées, 91128 Palaiseau Cedex, France.

MIKELLIDES, Y. G. 1999. *Theoritical modelling and optimization of ablation-fed pulsed plasma thruster.* Thèse de doctorat, Ohio State University.

MORROW, R. 1986. «A survey of the Electron and Ion Transport Properties of SF_6». *IEEE Transaction on plasma science*, 14, 234–39.

MOTT-SMITH, H. M. 1951. «The Solution of the Boltzmann Equation for a Shock Wave». *Physical Review*, 82, 885–892.

MÜLLER, L. 1993. «Modelling of an ablation controlled arc». *Journal of Physics D : Applied Physics*, 26, 1253–1259.

NOESKE, H. O. 1977. «Investigating of Dynamic Nozzle Parameters for Various Nozzle Geometries and Test Conditions of an Experimental Half Size SF_6 Puffer Breaker». *IEEE Trans. on PAS*, PAS-96, 896–906.

OSAWA, N. ET YOSHIOKA, Y. 2003. «Analysis of Nozzle Ablation Characteristics of Gas Circuit Breaker». . I. P. Transmission et D. Conference, éditeurs, *Proceedings of the IEEE Power Engineering Society Transmission and Distribution Conference*. Institute of Electrical and Electronics Engineers Inc., Dallas, TX, United States, vol. 2, 810–815.

OSHER, S. ET SOLOMON, F. 1982. «Upwind Difference Schemes for Hyperbolic Systems of Conservation Laws». *Math. of Computation*, 38, 339–374.

OZISIK, M. N. 1994. *Finite Difference Methods in Heat Transfer*. CRC Press.

PAUL, K., SAKUTA, T., TAKASHIMA, T. ET ISHIKAWA, M. 1997. «The dynamic behaviour of wall-stabilized SF_6 arcs contaminated by Cu and PTFE vapours». *Journal of Physics D : Applied Physics*, 30, 103–112.

PEDERSEN, A. 1970. «Criteria for spark breakdown in sulfur hexafluoride». *IEEE Trans.*, PAS-89, 2043–2048.

PEDERSEN, A. 1989. «On the electrical breakdown of gaseous dielectrics». *IEEE Transactions on Electrical Insulation*, 24, 721–739.

PEREZ, D. ET LEWIS, L. J. 2002. «Ablation of Solids under Femtosecond Laser Pulses». *Physical Review Letters*, 89, 255504/1–255504/4.

ROE, P. L. 1981. «Approximate Riemann Solvers, Parameter Vectors and Difference Schemes». *Journal of Computational Physics*, 43, 357–372.

RUCHTI, C. B. ET NIEMEYER, L. 1986. «Ablation controlled arcs». *IEEE Transactions on Plasma Science*, 14, 423–434.

SHUEN, J. S., LIOU, M. ET VAN LEER, B. 1990. «Inviscid Flux-Splitting Algorithms for real Gases with Non-Euilibrium Chemistry». *Journal of Computational Physics*, 90, 371–395.

TELFER, D., SPENCER, J. ET JONES, G. 2004. «A Chemical Puffer Circuit-Breaker without SF_6». *XVth International Conference on Gas Discharges and their Applications*. CPAT Toulouse, Toulouse, France, vol. 1, 89–91.

TRÉPANIER, J.-Y., REGGIO, M. ET CAMARERO, R. 1993. «Automated Geometric-Based Mesh Requirements for Adaptive Flow Computations». A. I. of Aeronautics et D. Astronautics, Washington, éditeurs, *31nd Aerospace Science Meeting*. Reno, NV, USA, AIAA Paper 1993-674.

TRÉPANIER, J.-Y., REGGIO, M., ZHANG, H. ET CAMARERO, R. 1991. «A Finite-Volume Method for the Euler Equations on Arbitrary Lagragian-Eulerian Grids». *Computer & Fluids*, 20, 399–409.

VOLLER, V. ET CROSS, M. 1981. «Accurate Solutions of Moving Boundary Problems Using the Enthalpy Method». *Int. J. Heat Mass Transfer.*, 24, 545–556.

ZAGHLOUL, M. R. 2004. «On the vaporization of Teflon and heated compound-materials in ablation controlled arcs». *Journal of Applied Physics*, 95, 3339–3343.

ZHANG, J., FANG, M. T. C. ET NEWLAND, D. B. 1987. «Theoritical investigation of a 2kA DC nitrogen arc in a supersonic nozzle». *Journal of Physicis D : Applied Physics*, 20, 368–379.

ZHANG, X. D., TRÉPANIER, J.-Y. ET CAMARERO, R. 1994. «Modelling and computation of acr-flow interaction in circuit-breakers». *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, 2, 41–64.

ANNEXE I

EXPLOSION DE PHASE

Ce processus consiste en la formation de régions gazeuses relativement larges à l'intérieur d'un solide. Ces «bulles» sont causées par l'apparition de larges gradients locaux de densité, qui sont eux-mêmes causés par le fait que le système est dans un état métastable lors du refroidissement suivant un chauffage brutal. Il est à noter que ce processus est présent lorsque l'énergie n'a pas franchi le seuil pour qu'il y ait un effet d'avalanche diélectrique, ou qu'il y ait formation d'un plasma en surface. L'explosion de phase est présente, entre autres, lors d'irradiation par des pulses laser ultrarapides. Dans ces conditions, le chauffage est presque isochore ce qui a pour conséquence que le refroidissement du matériau se fait très rapidement, et de façon adiabatique. Bref, l'explosion de phase est donc une transition liquide-gaz.

Il est possible de décrire le processus avec un graphique densité température, permettant ainsi de situer les différents états et phases du solide. Comme on le voit sur la partie II du côté gauche de la figure (I.1), le matériau se retrouve tout d'abord dans la région de coexistence solide liquide (entre la ligne segmentée), avant de complètement fondre. Lors de la relaxation, la ligne binodale (ligne pleine) est franchie. Par l'endroit où la branche dense (carrés noirs) se sépare de la branche macroscopique (losange blanc), on déduit que la création de pores ne se fait qu'après que le système soit dans un état métastable (région où l'explosion de phase se produit), ce qui permet de conclure qu'on est en présence de nucléation homogène. Il est à noter que ces pores sont à l'état gazeux, et qu'ils augmentent de volume, contrairement à la partie plus dense, qui elle demeure à température et densité constantes.

Deux caractéristiques principales au niveau temporel définissent ce mode d'ablation. La première est le temps nécessaire à mettre les atomes en mouvement. On

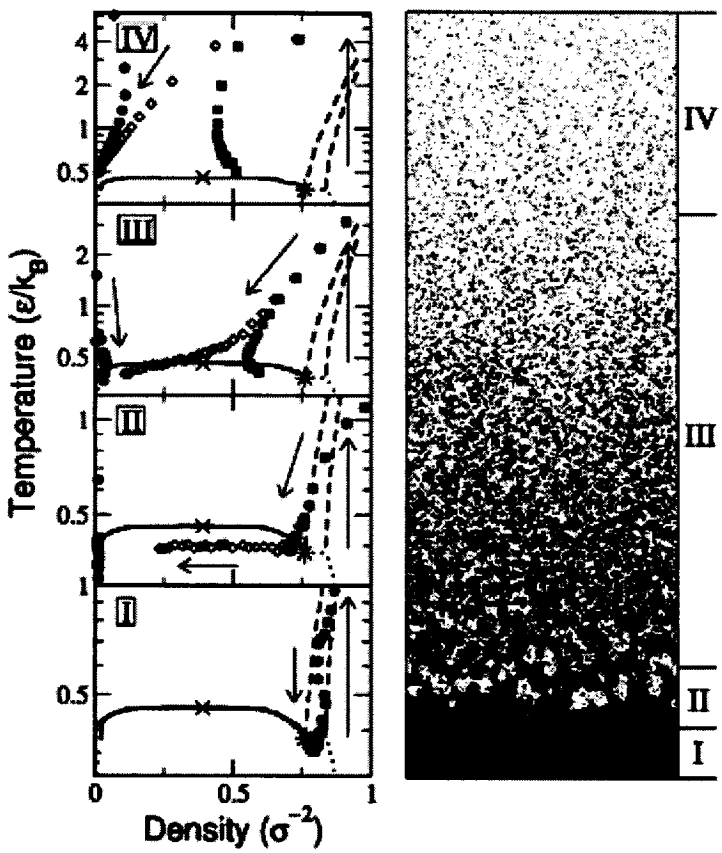


FIG. I.1 *Évolution du système dans le plan densité-température (figure tirée de Perez et Lewis (2002))*

définit ce temps comme étant $\tau_s = \frac{1}{c\alpha}$, où c est la vitesse du son et $1/\alpha$ la distance de pénétration optique. Il est à noter que la vitesse du son est dépendante de la densité, et varie donc. La seconde caractéristique définissant ce mode est le temps seuil τ_{th} pour qu'une diffusion thermique significative soit observée. Avec ces deux définitions, on peut donc définir une durée maximale du pulse d'énergie, $\tau_L^c \approx \tau_s \approx \tau_{th}$.

Avec des valeurs caractéristiques de $c \sim 1000$ m/s et $1/\alpha \sim 10^{-8}$ m , on trouve que la durée maximale du pulse pour observer une explosion de phase est de l'ordre de 10^{-11} s. Si la durée du pulse est supérieure à cette limite, c'est la fragmentation qui devient le mécanisme d'ablation dominant.

ANNEXE II

L'ÉQUATION DE LIOUVILLE

II.1 L'état d'un système

En supposant qu'un gaz pur soit défini par un nombre N de particules, il est possible d'en définir l'état en observant chacune de ses particules (Delcroix et Bers 1994, chap. 8). Ainsi, l'état d'une particule ponctuelle 1 se définit par son vecteur position et son vecteur vitesse :

$$\begin{aligned} r_1 &= (x_1, y_1, z_1) \\ w_1 &= (u_1, v_1, w_1) \end{aligned}$$

Il est à noter que la présente approche néglige la rotation et la vibration interne des particules. À l'aide de ces définitions, il est donc possible de définir exactement l'état d'un gaz à N particules identiques avec l'ensemble des vecteurs :

$$r_1, r_2, \ldots, r_N$$

$$w_1, w_2, \ldots, w_N$$

Bref, l'état d'un gaz comporte 6N dimensions. Il appert qu'il est difficile de décrire explicitement le système puisque, pour un gaz, 6N est extrêmement grand. De plus, le principe d'incertitude d'Heisenberg, en mécanique quantique, dicte qu'il est impossible de prédire précisément la position d'une particule si on en connaît exactement la vitesse, et vice-versa. Bref, il est essentiel de généraliser le système pour pouvoir en tirer une quelconque information. Pour ce faire, on définit tout d'abord un élément de volume ainsi qu'un élément de l'espace des vitesses :

- Élément de volume : $dr_1 = dx_1 dy_1 dz_1$

– Élément de l'espace des vitesses : $dw_1 = du_1 dv_1 dw_1$

À partir de ces éléments d'espace, il est donc possible de définir :

$$D = D(dr_1, dw_1, dr_2, dw_2, \ldots, dr_N, dw_N, t)$$

Ce qui représente la probabilité qu'à l'instant t, la particule 1 se retrouve dans le volume dr_1 et que sa vitesse soit comprise dans l'espace dw_1, et ce, au même moment que toutes les autres particules se retrouvent dans leur espace respectif (c'est-à-dire que r_N et w_N soient respectivement dans dr_N et dw_N). Et, la probabilité que le système (gaz) se trouve dans un état donné, c'est-à-dire d'un élément de volume à 6N dimensions, est :

$$D dr_1 dw_1 dr_2 dw_2 \ldots dr_N dw_N$$

Ainsi, la probabilité que le système soit dans un état quelconque devient :

$$1 = \int D dr_1 dw_1 dr_2 dw_2 \ldots, dr_N dw_N$$

II.2 Variables conjuguées

Afin de simplifier l'expression de l'équation de Liouville, il est d'usage de l'écrire avec des variables conjugées, telles que définies par Hamilton. Ainsi, avec les variables conjuguées p_i et q_i, la probabilité de trouver un système dans un état donné devient :

$$\mathcal{D}(p_i, q_i, t) d\Omega$$

où $d\Omega = dq_1 dp_1 \ldots dq_N dp_N$. Ces définitions font référence au Hamiltonien $H(q_i, p_i)$ d'où découlent les équations du mouvement d'Hamilton-Jacobi :

$$\begin{aligned} \frac{dq_i}{dt} &= \frac{\partial H}{\partial p_i} \\ \frac{dp_i}{dt} &= -\frac{\partial H}{\partial q_i} \end{aligned}$$

Puisque la dépendance temporelle n'a pas d'incidence sur la probabilité de trouver le système dans un état donné, on peut donc équivaloir celle-ci pour le temps t et le temps t' :

$$\mathcal{D}(p_i, q_i, t)d\Omega = \mathcal{D}'(p_i', q_i', t')d\Omega'$$

et comme le «volume» $d\Omega$ est le même que $d\Omega'$, on obtient donc que $\mathcal{D} = \mathcal{D}'$, ce qui implique que :

$$\frac{d\mathcal{D}}{dt} = 0$$

En utilisant les règles de la dérivation en chaîne, on obtient l'équation de Liouville exprimée avec les variables conjuguées :

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

II.3 Hamiltonien

L'Hamiltonien non relativiste du système s'écrit :

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} + \sum_i \phi_i + \sum_i \sum_{i<j} \phi_{ij}$$

où $p_i = mw_i$, ϕ_i est l'énergie potentielle des forces externes et ϕ_{ij} est l'énergie potentielle de l'interaction entre deux particules. On néglige toutes formes d'interaction plus complexes. Les équations d'Hamilton-Jacobi, énoncées ci-haut, nous

permettent de trouver :

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{\partial q_i}{\partial t} = v_i$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = \frac{\partial p_i}{\partial t} = -\frac{\partial \phi_i}{\partial q_i} - \sum_{j \neq i} \frac{\partial \phi_{ij}}{\partial x_i} = X_i - \sum_{j \neq i} X_{ij}$$

où $X_i - \sum_{j \neq i} X_{ij}$ sont les forces qui agissent sur la particule i. On en retient donc que les variables q_i et p_i sont un couple de variables conjuguées. De plus, puisque, $q_i = r_i$, on peut réécrire la probabilité de retrouver un élément de volume dans l'espace en fonction de celles-ci de cette façon :

$$\mathcal{D} dr_1 dm w_1 dr_2 dm w_2 \ldots dr_N dm w_N$$

où, selon les variables initiales :

$$D dr_1 dw_1 dr_2 dw_2 \ldots dr_N dw_N$$

ce qui permet d'écrire :

$$D(r_i, w_i, t) = m^{3N} \mathcal{D}(r_i, m w_i, t)$$

d'où l'on voit que pour passer de la probabilité qui est fonction des variables conjuguées à celle qui est fonction des variables physiques, il suffit de multiplier par m^{3N}. Bref, en divisant l'équation (II.1) par cette même quantité on obtient l'équation de Liouville fonction de D :

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N} w_i \cdot \frac{\partial D}{\partial r_i} + \sum_i \frac{X_i + \sum_{j \neq i} X_{ij}}{m} \cdot \frac{\partial D}{\partial w_i} = 0 \qquad \text{(II.2)}$$

avec, pour les plasmas :

$$X_i = q_i(\mathbf{E}_i + w_i \times \mathbf{B}_i)$$

$$X_{ij} = -\nabla_i \left[\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} \right]$$

où **E** et **B** sont respectivement les vecteurs champ électrique et champ magnétique.

II.4 Système d'équations de BBGKY

Bien que le développement précédent permette de connaître dans ses moindres détails l'état d'un fluide, il reste qu'en pratique, ces équations sont inutilisables, et l'on doit se contenter de fonctions plus simples qui généralisent l'état. En suivant ce raisonnement, il est possible d'utiliser une méthode régressive pour déduire la probabilité qu'une particule 1 se retrouve dans un élément de volume dr_1, avec sa vitesse comprise dans dw_1, sans aucune précision sur le reste du système. Comme toutes les particules sont identiques et indiscernables, cette probabilité est la même pour toutes les particules ; il faut donc la multiplier par N (le nombre de particules). Cette probabilité est :

$$\begin{aligned} \langle dN \rangle_1 &= N dr_1 dw_1 \int D dr_2 dw_2 \ldots dr_N dw_N \\ &= f_1 dr_1 dw_1 \end{aligned}$$

où

$$f_1 = \int D dr_2 dw_2 \ldots dr_N dw_N \tag{II.3}$$

De la même façon, il est possible de déterminer la probabilité qu'une particule 1 soit dans l'espace dr_1 et que sa vitesse soit dans l'espace des vitesses dw_1 en même temps qu'une particule 2 soit dans l'espace dr_2 et que sa vitesse soit dans l'espace des vitesses dw_2, et ce, sans aucune contrainte sur le reste du système. On obtient donc :

$$\langle dN \rangle_{12} = f_{12} dr_1 dw_1 dr_2 dw_2$$

Avec :

$$f_{12} = N(N-1) \int D dr_3 dw_3 \ldots dr_v dw_w \tag{II.4}$$

Il est possible de corréler ces deux équations de probabilité de cette façon :

$$f_{12} = \frac{N-1}{N} f_1 f_2$$

et puisque N est immensément grand :

$$f_{12} = f_1 f_2$$

Ainsi, grâce à cette corrélation, il suffit de multiplier l'équation de Liouville (II.2) par N et d'intégrer sur $dr_2 dw_2 \ldots dr_N dw_N$, pour obtenir l'équation d'évolution de f_1. L'évaluation du premier terme de l'intégrale est directe, en utilisant l'équation (II.3) :

$$N \int \frac{\partial D}{\partial t} dr_2 dw_2 \ldots dr_N dw_N = \frac{\partial f_1}{\partial t}$$

Pour ce qui est du deuxième terme, l'évaluation est légèrement plus complexe. Après la multiplication, l'expression devient :

$$N \int \sum_{i=1}^{N} w_i \cdot \frac{\partial D}{\partial r_i} dr_2 dw_2 \ldots dr_N dw_N = \frac{\partial f_1}{\partial t}$$

Le premier terme de la sommation ($i = 1$) s'évalue simplement, à l'aide de l'équation (II.3). Puisque, tel que discuté au préalable, les particules sont indiscernables, les autres termes de la sommation sont identiques, ce qui nous permet d'écrire :

$$w_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial r_1} + N(N-1) \int w_2 \cdot \frac{\partial D}{\partial r_2} dr_2 dw_2 \ldots dr_N dw_N$$

Et grâce à l'équation (II.4), on obtient :

$$w_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial r_1} + \int w_2 \left(\int_V \frac{\partial f_{12}}{\partial r_2} \right) dw_2$$

Il est d'usage de négliger la seconde partie de ce terme puisqu'on peut faire l'hypothèse que f_{12} est nul quand la particule 2 est sur la limite du volume V du gaz, ce qui a pour effet de rendre l'intégrale sur V nulle. Le troisième terme de l'équation, celui dû aux forces externes, est traité de la même façon que le second. Ainsi, pour $i = 1$, on obtient :

$$\frac{X_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial w_1}$$

Et pour les autres termes :

$$\frac{1}{m} \int X_2 \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial w_2} dr_2 dw_2$$

On peut négliger ce dernier terme puisque, de façon générale, les forces externes ne dépendent pas de la vitesse des particules, et si elles le font, comme pour les forces de Lorentz, la dépendance ne se fait pas dans la même direction vectorielle. Suivant le même raisonnement, on obtient le dernier terme de l'équation, celui des forces d'interactions :

$$\frac{1}{m} \int X_{12} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial w_1} dr_2 dw_2$$

Ainsi, l'équation d'évolution de f_1 est donc :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + w_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial r_1} + \frac{X_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial w_1} + \int \frac{X_{12}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial w_1} dr_2 dw_2 = 0 \qquad \text{(II.5)}$$

À la lumière de cette équation, il est nécessaire de décrire f_{12}. Pour ce faire, il suffit d'appliquer le même raisonnement que pour f_1, en intégrant cette fois

l'équation de Liouville (II.2) sur $dr_3 dw_3 \ldots dr_N dw_N$. On obtient donc :

$$\frac{\partial f_{12}}{\partial t} + w_1 \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial r_1} + w_2 \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial r_2} + \frac{X_1 + X_{12}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial w_1} + \frac{X_2 + X_{21}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial w_2} \tag{II.6}$$

$$+ \int \frac{X_{13}}{m} \cdot \frac{\partial f_{123}}{\partial w_1} dr_3 dw_3 + \int \frac{X_{23}}{m} \cdot \frac{\partial f_{123}}{\partial w_2} dr_3 dw_3 = 0 \tag{II.7}$$

Il est à noter qu'avec ces deux équations d'évolution, le système d'équations décrivant l'état d'un gaz n'est toujours pas fermé puisque f_{123} reste à décrire. Le système est donc récursif, et comporte donc N équations, c'est-à-dire le même que le nombre de particules dans le gaz. C'est ce système qu'on nomme BBGKY.

II.5 Équation de Boltzmann

Dans un contexte pratique, et surtout dans celui du présent développement, le système d'équations BBGKY est inutilisable. Non seulement, le nombre d'équations est faramineux, mais encore faudrait-il être en mesure d'édicter correctement les forces d'interactions multiples. Il appert que des hypothèses simplificatrices doivent être formulées afin de réduire le nombre d'équations et fermer le système. En négligeant différents termes des équations (II.5) et (II.7), plusieurs équations d'évolution sont obtenues :

- Équation de Boltzmann sans second membre
- Équation de Liouville à une particule
- Équation de Vlasov
- Équation de Boltzmann

Bien que ce soit généralement l'équation de Vlasov qui est utilisée pour les plasmas, le contexte actuel requiert plutôt l'utilisation de l'équation de Boltzmann, puisque les interactions entre particules ne doivent pas être négligées, mais plutôt traitées comme des collisions binaires. Dans une optique d'ablation, il est impératif de tenir compte des collisions entre particules, ce qui élimine l'approche de Vlasov.

Afin d'obtenir l'équation de Boltzmann à partir de l'équation d'évolution de f_1 et de f_{12} il est nécessaire, tout d'abord, de négliger les interactions triples, ce qui revient à faire disparaître le terme en f_{123} de l'équation (II.7). On suppose aussi que les forces en jeu ont un court rayon d'action, ce qui est une hypothèse toute naturelle si on ne considère pas les interactions triples. Suivant cette logique, on suppose aussi que les forces d'interactions doubles sont dominantes à l'intérieur de ce rayon d'action. Finalement, les variations de f_{12} par rapport au temps et à l'espace peuvent aussi être négligées, puisque celles-ci sont lentes dans le cadre d'une collision, ainsi qu'en fonction des forces non négligeables. Les détails de ces hypothèses sont clairement énoncés dans Delcroix et Bers (1994). Avec toutes ces simplifications, on obtient donc l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + w_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial r_1} + \frac{X_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial w_1} = J(f_1) \tag{II.8}$$

où $J(f_1)$ représente le terme de collision :

$$J(f_1) = \int (f_1' f_2' - f_1 f_2) g d\Sigma_w$$

où l'intégrant $d\Sigma_w$ représente un élément de surface dans le plan perpendiculaire à la vitesse relative initiale$(w_2 - w_1)$, et g représente le module de cette vitesse relative.

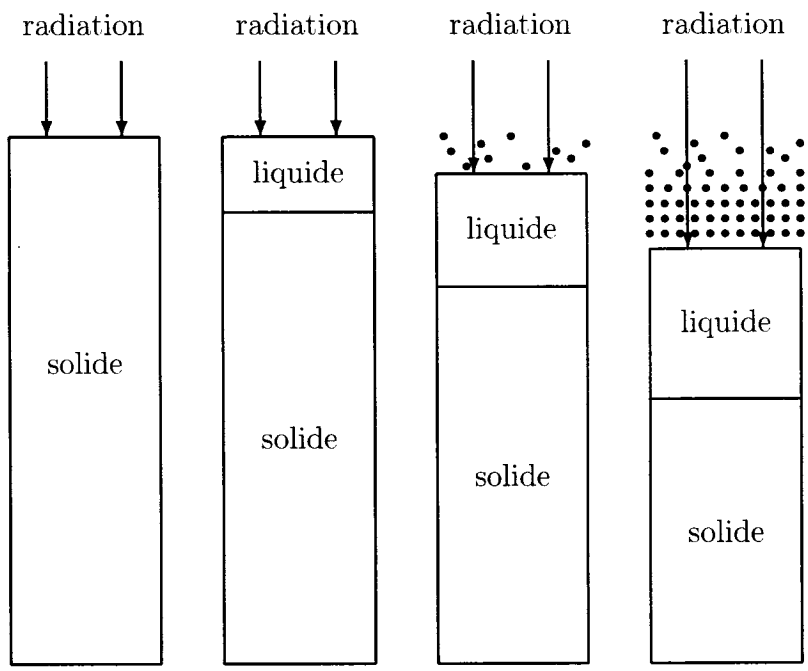
ANNEXE III

ABLATION EN RÉGIME PERMANENT

Avant qu'elle ne soit vaporisée, une paroi solide subit plusieurs changements physiques : tout d'abord, elle est chauffée, puis fondue et finalement vaporisée (Dowden 2001). Lorsque ce dernier seuil est atteint, de la matière est donc injectée dans le milieu ambiant, et la frontière entre les phases liquide et gazeuse se déplace, de même que celle entre les phases liquide et solide. En décrivant correctement la relation entre la paroi et le milieu ambiant, il est possible de connaître la vitesse de déplacement de ces frontières, de même que leur position. Mais puisque cette dernière n'est pas connu d'avance, la solution de ce problème, mieux connue sous le nom du problème de Stefan, est très complexe. Cependant, sur une période de temps donnée et si l'énergie est constante, on peut supposer que la distribution de chaleur à l'intérieur d'une paroi atteint un état d'équilibre, et la vitesse des frontières est identique. De par cette hypothèse, on peut considérer l'épaisseur liquide de la paroi constante. La figure (III.1) présente ce processus transitoire : en a), toute la paroi est solide, en b) une partie est fondue, en c) l'ablation apparaît et en d), le régime permanent est atteint. Avec le système de coordonnées illustré à la figure (III.2), il est possible de décrire la distribution de température dans la paroi avec l'équation de la chaleur :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{k}{\rho c_P} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \tag{III.1}$$

où ρ est la densité, k la conductivité thermique et c_P la chaleur spécifique à pression constante. En posant a comme l'épaisseur de la zone fondue, on peut définir les



(a) *Paroi entièrement solide*

(b) *Début de la liquéfaction*

(c) *Début de l'ablation*

(d) *Régime permanent atteint*

FIG. III.1 *Étapes menant au régime permanent de l'ablation d'une paroi.*

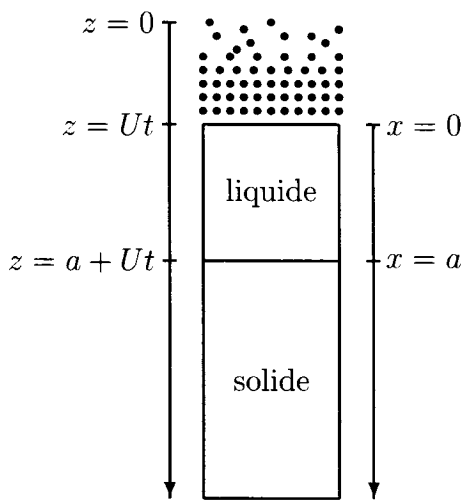


FIG. III.2 *Systèmes de coordonnées x et z pour le calcul de la distribution de la température à l'intérieur de la paroi*

conditions frontières suivantes :

$$\begin{aligned}
T &= T_V \quad \text{à} \quad z = Ut \\
-k\frac{\partial T}{\partial z} &= \rho L_V U + Q_{\text{rad}} \quad \text{à} \quad z = Ut \\
T &= T_L \quad \text{à} \quad z = a + Ut \\
-\left[k\frac{\partial T}{\partial z}\right]_{solide}^{liquide} &= \rho L_L U \quad \text{à} \quad z = a + Ut \\
T &= T_{\text{init}} \quad \text{à} \quad z = \infty
\end{aligned}$$

où L_L et T_L sont respectivement la chaleur latente et la température de liquéfaction, alors que L_V et T_V sont celles de vaporisation. Q_{rad} représente l'énergie incidente et T_{init} la température initiale du système. Puisque l'on suppose que le phénomène est stationnaire, il est donc d'usage de se placer dans le référentiel du front d'ablation, avec le changement de variable $x = z - Ut$. L'équation (III.1) doit aussi être traitée

en fonction du milieu dans lequel le calcul évolue. En tenant compte de ceci, et en posant un changement de variables pour alléger les calculs, on peut donc définir, dans le liquide :

$$\Theta(x) = \frac{T(x) - T_L}{T_V - T_L}$$

Ceci permet de transformer l'équation (III.1) de la façon suivante (en considérant k, c_P et ρ constants dans le liquide ou solide) :

$$-U\frac{\partial\Theta}{\partial x} = \frac{k_l}{\rho_l c_{Pl}}\frac{\partial^2\Theta}{\partial x^2} \tag{III.2}$$

Pour ce qui est des conditions limites, elles se transforment ainsi :

$$\begin{aligned}\Theta'(0) &= \frac{Q_{\text{rad}} - \rho_l L_V U}{k_l(T_V - T_L)}\\ \Theta(0) &= 1\\ \Theta(a) &= 0\end{aligned}$$

Dans le solide, on peut poser le changement suivant :

$$\Psi(x) = \frac{T(x) - T_{\text{init}}}{T_L - T_{\text{init}}}$$

Et ainsi transformer l'équation (III.1) (avec, cette fois, k, c_P et ρ constants dans le solide) :

$$-U\frac{\partial\Psi}{\partial x} = \frac{k_s}{\rho_s c_{Ps}}\frac{\partial^2\Psi}{\partial x^2} \tag{III.3}$$

Ceci permet de transformer les conditions limites ainsi :

$$\begin{aligned}-k_l(T_V - T_L)\Theta'(a) + k_s(T_L - T_{\text{init}})\Psi'(a) &= \rho_s L_L U\\ \Psi(a) &= 1\\ \Psi(\infty) &= 0\end{aligned}$$

Pour résoudre les équations, il suffit d'un simple changement de variables, suivi d'une double intégration. En utilsant les conditions frontières de Dirichlet, on obtient les fonctions suivantes :

$$\Theta(x) = \frac{1 - e^{\frac{\rho_l c_{Pl}}{k_l} U(a-x)}}{1 - e^{\frac{\rho_l c_{Pl}}{k_l} Ua}}$$

$$\Psi(x) = e^{\frac{\rho_s c_{Ps}}{k_s} U(a-x)}$$

Alors qu'en utilisant les conditions frontières de Neumann, on obtient ces deux équations :

$$e^{\frac{\rho_l c_{Pl}}{k_l} Ua} = 1 + \frac{\rho_l c_{Pl}(T_V - T_L)}{\rho_s L_L + \rho_s c_{Ps}(T_L - T_{\text{init}})}$$

$$Q_{\text{rad}} = U \left(\rho_l L_V + \frac{\rho_l c_{Pl}(T_V - T_L)}{1 - e^{-\frac{\rho_l c_{Pl}}{k_l} Ua}} \right)$$

En combinant ces deux équations, il est ainsi possible d'obtenir une valeur pour la vitesse U :

$$U = \frac{Q_{\text{rad}}}{\rho_l L_V + \rho_s L_L + \rho_l c_{Pl}(T_V - T_L) + \rho_s c_{Ps}(T_L - T_{\text{init}})}$$

Il suffit de diviser les termes par la densité du solide pour obtenir le débit massique par unité de surface $\dot{m}$. Grâce à cette équation, on peut facilement évaluer la quantité de matière qui est expulsée en fonction de l'énergie radiative incidente Q_{rad}.

En observant la figure (1.5), on constate que les vapeurs de PTFE sont émises aux alentours de 3500 K, ce qui est nettement plus élevé que la température d'évaporation qui tourne autour des 1000K (selon les conditions du problème). Bref, pour tenir compte de la photodégradation, il est donc nécessaire d'ajouter une correction énergétique à l'équation du débit massique : cette quantité, notée δh_a, est simplement la différence entre les énergies internes de la vapeur à son état

initial (1000 K) et à son état final (3500 K). En posant $h_v = \rho_l L_V + \rho_s L_L + \rho_l c_{Pl} T_V - T_L) + \rho_s c_{Ps}(T_L - T_{\text{init}})$, ce qui représente l'enthalpie nécessaire à chauffer le mur solide à la température de la pièce jusqu'à son point de vaporisation, on obtient :

$$\dot{m} = \frac{Q_{\text{rad}} \rho_s}{h_v + \delta h_a}$$

Pour le PTFE, $h_v = 2.60 \times 10^6$J/kg, $e_{1000} = 5.91 \times 10^6$ J/kg et $e_{3500} = 14.84 \times 10^6$ J/kg.

ANNEXE IV

ÉVALUATION DES INVARIANTS INTÉGRAUX

Anisimov (1968) décrit l'ablation de la paroi à l'aide de l'équation suivante :

$$f(x, \mathbf{v}) = \alpha(x) f_a(\mathbf{w}) + [1 - \alpha(x)]\, f_b(\mathbf{w})$$

où

$$f_a(\mathbf{w}) = \begin{cases} n_a \left(\frac{m}{2\pi k_B T_a}\right)^{3/2} e^{-\frac{mw^2}{2\pi k_B T_a}} & \text{si } w_x > 0 \\ \beta f_b(\mathbf{w}) & \text{si } w_x < 0 \end{cases}$$

$$f_b(\mathbf{w}) = n_b \left(\frac{m}{2\pi k_B T_b}\right)^{3/2} e^{-m\frac{(w_x - u_b)^2 + w_y^2 + w_z^2}{2\pi k_B T_b}}$$

avec $u_b = M\sqrt{\frac{2k_B T_b}{m}}$, où M est le nombre de Mach, k_B la constante de Boltzman et m la masse atomique du gaz. La fonction $\alpha(x)$ est inconnue, mais possède les conditions frontières $\alpha(x_a) = 1$ et $\alpha(x_b) = 0$. La variable β représente la proportion de particules qui retournent vers la paroi, c'est-à-dire pour lesquelles $w_x < 0$.

IV.1 Conservation de la quantité de mouvement

On obtient l'équation de la conservation de la quantité de mouvement en évaluant l'invariant intégral suivant :

$$C_L = \int w_x f(x, \mathbf{w}) d\mathbf{w}$$

Évalué en $x = x_a$, on obtient :

$$
\begin{aligned}
C_L &= \int w_x f(x_a, \mathbf{w}) d\mathbf{w} \\
&= \int_{-\infty}^{0}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x \beta n_b \left(\frac{m}{2\pi k_B T_b}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T_b}\left((w_x-u_b)^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \\
&\quad + \int_{0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x n_a \left(\frac{m}{2\pi k_B T_a}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T_a}\left(w_x^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \\
&= \beta n_b \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T_b}} \int_{-\infty}^{0} w_x e^{-\frac{m}{2k_B T_b}(w_x-u_b)^2} dw_x \\
&\quad + n_a \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T_a}} \int_{0}^{\infty} w_x e^{-\frac{m}{2k_B T_a} w_x^2} dw_x \\
&= -\beta n_b \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T_b}} \int_{0}^{\infty} w_x e^{-\frac{m}{2k_B T_b}(w_x+u_b)^2} dw_x + n_a \sqrt{\frac{k_B T_a}{2\pi m}} \\
&= -\beta n_b \sqrt{\frac{2k_B T_b}{m}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{M}^{\infty} (\omega - M) e^{-\omega^2} d\omega + n_a \sqrt{\frac{k_B T_a}{2\pi m}} \\
&= -\beta n_b \sqrt{\frac{2k_B T_b}{m}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[-\frac{1}{2} e^{-\omega^2} \Big|_{M}^{\infty} - M \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erfc}(M) \right] + n_a \sqrt{\frac{k_B T_a}{2\pi m}} \\
&= -\beta n_b u_b \frac{1}{2} \left[\frac{e^{-M^2}}{M\sqrt{\pi}} - \operatorname{erfc}(M) \right] + n_a \sqrt{\frac{k_B T_a}{2\pi m}}
\end{aligned}
$$

avec le changement de variable $\omega = w_x \sqrt{\frac{m}{2k_B T_b}} + M$.

Alors qu'évalué en $x = x_b$, on trouve :

$$\begin{aligned}
C_L &= \int w_x f(x_b, \mathbf{w}) d\mathbf{w} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x n_b \left(\frac{m}{2\pi k_B T_b}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T_b}\left((w_x-u_b)^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \\
&= n_b \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T_b}} \int_{-\infty}^{\infty} w_x e^{-\frac{m}{2k_B T_b}(w_x-u_b)^2} dw_x \\
&= n_b \sqrt{\frac{2k_B T_b}{m}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (\omega + M) e^{-\omega^2} d\omega \\
&= n_b \sqrt{\frac{2k_B T_b}{m}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[-\frac{1}{2} e^{-\omega^2}\Big|_{-\infty}^{\infty} + M \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\omega^2} d\omega \right] \\
&= n_b \sqrt{\frac{2k_B T_b}{m}} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[0 + M\sqrt{\pi}\right] \\
&= n_b u_b
\end{aligned}$$

avec le changement de variable $\omega = w_x \sqrt{\frac{m}{2k_B T_b}} - M$. Ainsi, pour la conservation de la quantité de mouvement, on obtient :

$$\boxed{n_b u_b = -\beta n_b u_b \frac{1}{2}\left[\frac{e^{-M^2}}{M\sqrt{\pi}} - \operatorname{erfc}(M)\right] + n_a \sqrt{\frac{k_B T_a}{2\pi m}}}$$

IV.2 Conservation de l'énergie

De la même manière que pour la quantité de mouvement, on pose les conditions pour le second invariant intégral :

$$C_E = \int w_x^2 f(x, \mathbf{w}) d\mathbf{w}$$

Et donc, en $x = x_a$:

$$
\begin{aligned}
C_E &= \int w_x^2 f(x_a, \mathbf{w}) d\mathbf{w} \\
&= \int_{-\infty}^{0}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x^2 \beta n_b \left(\frac{m}{2\pi k_B T_b}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T_b}\left((w_x-u_b)^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \\
&\quad + \int_{0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x^2 n_a \left(\frac{m}{2\pi k_B T_a}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T_a}\left(w_x^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \\
&= \beta n_b \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T_b}} \int_{-\infty}^{0} w_x^2 e^{-\frac{m}{2k_B T_b}(w_x-u_b)^2} dw_x \\
&\quad + n_a \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T_a}} \int_{0}^{\infty} w_x^2 e^{-\frac{m}{2k_B T_a} w_x^2} dw_x \\
&= \beta n_b \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T_b}} \int_{0}^{\infty} w_x^2 e^{-\frac{m}{2k_B T_b}(w_x+u_b)^2} dw_x + n_a \frac{k_B T_a}{2m} \\
&= \beta n_b \frac{2k_B T_b}{m} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{M}^{\infty} (\omega - M)^2 e^{-\omega^2} d\omega + n_a \frac{k_B T_a}{2m} \\
&= \beta n_b \frac{2k_B T_b}{m} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\int_{M}^{\infty} \omega^2 e^{-\omega^2} - 2M \int_{M}^{\infty} \omega e^{-\omega^2} + M^2 \int_{M}^{\infty} e^{-\omega^2}\right] + n_a \frac{k_B T_a}{2m} \\
&= \beta n_b \frac{2k_B T_b}{m} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{1}{2} M e^{-M^2} + \frac{1}{2}\frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erfc}(M)\right. \\
&\quad \left. - M e^{-M^2} + M^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \operatorname{erfc}(M)\right] + n_a \frac{k_B T_a}{2m} \\
&= -\beta n_b u_b^2 \left[\frac{1}{2}\left(\frac{e^{-M^2}}{M\sqrt{\pi}} - \operatorname{erfc}(M)\right) - \frac{1}{4M^2} \operatorname{erfc}(M)\right] + n_a \frac{k_B T_a}{2m}
\end{aligned}
$$

avec le changement de variable $\omega = w_x\sqrt{\frac{m}{2k_BT_b}} + M$. Pour la frontière $x = x_b$:

$$\begin{aligned}
C_E &= \int w_x^2 f(x_b, \mathbf{w}) d\mathbf{w} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x^2 n_b \left(\frac{m}{2\pi k_B T_b}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_BT_b}\left((w_x-u_b)^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \\
&= n_b\sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T_b}} \int_{-\infty}^{\infty} w_x^2 e^{-\frac{m}{2k_BT_b}(w_x-u_b)^2} dw_x \\
&= n_b \frac{2k_BT_b}{m}\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (\omega + M)^2 e^{-\omega^2} d\omega \\
&= n_b \frac{2k_BT_b}{m}\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 e^{-\omega^2} d\omega + 2M\int_{-\infty}^{\infty} \omega e^{-\omega^2} d\omega + M^2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-\omega^2} d\omega\right] \\
&= n_b \frac{2k_BT_b}{m}\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\frac{\sqrt{\pi}}{2} + 0 + M^2\sqrt{\pi}\right] \\
&= n_b u_b^2 + n_b \frac{k_BT_b}{m}
\end{aligned}$$

avec le changement de variable $\omega = w_x\sqrt{\frac{m}{2k_BT_b}} - M$.

Ce qui nous permet d'obtenir l'équation de la conservation de l'énergie :

$$\boxed{n_b u_b^2 + n_b\frac{k_BT_b}{m} = n_a\frac{k_BT_a}{2m} - \beta n_b u_b^2\left[\frac{1}{2}\left(\frac{e^{-M^2}}{M\sqrt{\pi}} - \operatorname{erfc}(M)\right) - \frac{1}{4M^2}\operatorname{erfc}(M)\right]}$$

IV.3 Conservation du flux de l'énergie thermique

Toujours selon la même méthodologie, on peut évaluer l'invariant intégral du flux énergétique :

$$C_Q = \int w_x w^2 f(x, \mathbf{w}) d\mathbf{w}$$

Pour la frontière $x = x_b$:

$$\begin{aligned} C_Q &= \int w_x w^2 f(x_b, \mathbf{w}) d\mathbf{w} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x(w_x^2 + w_y^2 + w_z^2) n_b \\ &\quad \times \left(\frac{m}{2\pi k_B T_b}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T_b}\left((w_x-u_b)^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \end{aligned} \tag{IV.1}$$

Le premier terme de cette équation est évalué ainsi :

$$\begin{aligned} & n_b \left(\frac{m}{2\pi k_B T_b}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x^3 e^{-\frac{m}{2k_B T_b}\left((w_x-u_b)^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \\ &= n_b \frac{m}{2k_B T_b}\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} w_x^3 e^{-\frac{m}{2k_B T_b}(w_x-u_b)^2} dw_x \\ &= n_b \left(\frac{2k_B T_b}{m}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (\omega + M)^3 e^{-\omega^2} d\omega \\ &= n_b \left(\frac{2k_B T_b}{m}\right)^{3/2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} \omega^3 e^{-\omega^2} d\omega + 3M^2 \int_{-\infty}^{\infty} \omega e^{-\omega^2} d\omega \right. \\ &\quad \left. +3M \int_{-\infty}^{\infty} \omega^2 e^{-\omega^2} d\omega + M^3 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\omega^2} d\omega \right] \\ &= n_b \frac{2k_B T_b}{m}\frac{1}{\sqrt{\pi}} \left[0 + 0 + 3M\frac{\sqrt{\pi}}{2} + M^3\sqrt{\pi}\right] \\ &= n_b u_b^3 \left(\frac{3}{2M^2} + 1\right) \end{aligned}$$

avec le changement de variable $\omega = w_x\sqrt{\frac{m}{2k_BT_b}} - M$. Pour ce qui est du second terme, il est évalué ainsi :

$$
\begin{aligned}
n_b\left(\frac{m}{2\pi k_BT_b}\right)^{3/2} &\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x w_y^2 e^{-\frac{m}{2k_BT_b}\left((w_x-u_b)^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \\
&= n_b\left(\frac{m}{2\pi k_BT_b}\right)\int_{-\infty}^{\infty} w_x e^{-\frac{m}{2k_BT_b}(w_x-u_b)^2}\left[\int_{-\infty}^{\infty} w_y^2 e^{-\frac{m}{2k_BT_b}w_y^2} dw_y\right] dw_x \\
&= n_b\sqrt{\frac{2k_BT_b}{m}}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} w_x e^{-\frac{m}{2k_BT_b}(w_x-u_b)^2} dw_x \\
&= n_b\left(\frac{2k_BT_b}{m}\right)^{3/2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty}(\omega+M)^2 e^{-\omega^2} d\omega \\
&= n_b\left(\frac{2k_BT_b}{m}\right)^{3/2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\frac{1}{2}\left[0+M\sqrt{\pi}\right] \\
&= n_b u_b^3\frac{1}{M^2}\frac{1}{2}
\end{aligned}
$$

avec le changement de variable $\omega = w_x\sqrt{\frac{m}{2k_BT_b}} - M$. Quant au troisième terme, il est identique au second puisque les directions y et z sont indiscernables. Évaluée en $x = x_b$, l'équation (IV.1) devient :

$$C_Q = n_b u_b^3\left(\frac{5}{2M^2}+1\right) \tag{IV.2}$$

L'évaluation à la paroi, c'est à dire à $x = x_a$, se fait ainsi :

$$\begin{aligned} C_Q &= \int w_x w^2 f(x_a, \mathbf{w}) d\mathbf{w} \\ &= \int_{-\infty}^{0}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x(w_x^2+w_y^2+w_z^2)\beta n_b \\ &\quad \times \left(\frac{m}{2\pi k_B T_b}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T_b}\left((w_x-u_b)^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \\ &\quad + \int_{0}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x(w_x^2+w_y^2+w_z^2) n_a \\ &\quad \times \left(\frac{m}{2\pi k_B T_a}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T_a}\left(w_x^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \end{aligned} \tag{IV.3}$$

Le premier terme de la première intégrale de l'équation (IV.3), c'est-à-dire celle donc l'intégrant dw_x est évaluée entre $-\infty$ et 0, se calcul ainsi :

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{0}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \beta w_x^3 n_b \left(\frac{m}{2\pi k_B T_b}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T_b}\left((w_x-u_b)^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \\ &\quad = -\beta n_b \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T_b}} \int_{0}^{/infty} w_x^3 e^{-\frac{m}{2k_B T_b}(w_x+u_b)^2} dw_x \\ &\quad = -\beta n_b \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_B T_b}{m}\right)^{3/2} \int_{M}^{/infty} \left(\omega^3 - 3M\omega^2 + 3M^2\omega - M^3\right) e^{-\omega^2} d\omega \\ &\quad = -\beta n_b u_b^3 \left[\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{2M^2}\right)\frac{e^{-M^2}}{M\sqrt{\pi}} - \left(\frac{1}{2}+\frac{3}{4M^2}\right)\ \mathrm{erfc}(M)\right] \end{aligned}$$

avec le changement de variable $\omega = w_x\sqrt{\frac{m}{2k_B T_b}} + M$. Le second terme de cette même

intégrale est trouvé selon :

$$\int_{-\infty}^{0}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\beta w_x w_y^2 n_b\left(\frac{m}{2\pi k_B T_b}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T_b}\left((w_x-u)^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x$$

$$= -\beta n_b \frac{m}{2\pi k_B T_b}\int_0^{\infty} w_x e^{-\frac{m}{2k_B T_b}(w_x-u)^2}\left[\int_{-\infty}^{\infty} w_y^2 e^{-\frac{m}{2k_B T_b}w_y^2} dw_y\right] dw_x$$

$$= -\beta n_b \frac{2k_B T_b}{m}\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\infty} w_x e^{-\frac{m}{2k_B T_b}(w_x+u_b)^2} dw_x$$

$$= -\beta n_b (\frac{2k_B T_b}{m})^{3/2}\frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_M^{\infty}(\omega - M)e^{-\omega^2} d\omega$$

$$= -\beta n_b u_b^3 \frac{1}{4M^2}\left(\frac{e^{-M^2}}{M\sqrt{\pi}} - \text{erfc}(M)\right)$$

avec le changement de variable $\omega = w_x\sqrt{\frac{m}{2k_B T_b}} + M$. Quant à la troisième partie, elle est identique à la seconde. Le premier terme de la seconde intégrale de l'équation (IV.3), c'est-à-dire celle dont l'intégrant dw_x est évaluée entre 0 et ∞, se trouve ainsi :

$$\int_0^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x^3 n_a\left(\frac{m}{2\pi k_B T_a}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T_a}\left(w_x^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x$$

$$= n_a\sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T_a}}\int_0^{\infty} w_x^3 e^{-\frac{m}{2k_B T_a}w_x^2} dw_x$$

$$= n_a \frac{1}{2}\frac{1}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{2k_B T_a}{m}\right)^{3/2}$$

La deuxième et troisième partie de cette intégrale est calculée de cette façon :

$$\begin{aligned}
&\int_0^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} w_x w_y^2 n_a \left(\frac{m}{2\pi k_B T_a}\right)^{3/2} e^{-\frac{m}{2k_B T_a}\left(w_x^2+w_y^2+w_z^2\right)} dw_z dw_y dw_x \\
&\qquad = n_a \frac{m}{2\pi k_B T_a} \int_0^{\infty} w_x e^{-\frac{m}{2k_B T_a} w_x^2} \left[\int_{-\infty}^{\infty} w_y^2 e^{-\frac{m}{2k_B T_a} w_y^2} dw_y\right] dw_x \\
&\qquad = n_a \frac{2k_B T_a}{m} \frac{1}{2} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} w_x e^{-\frac{m}{2k_B T_a} w_x^2} dw_x \\
&\qquad = n_a \frac{1}{4} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_B T_a}{m}\right)^{3/2}
\end{aligned}$$

Finalement, lorsqu'évaluée en $x = x_a$, l'équation (IV.1) devient :

$$C_Q = \frac{n_a}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_B T_a}{m}\right)^{3/2} - \beta n_b u_b^3 \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{M^2}\right) \frac{e^{-M^2}}{M\sqrt{\pi}} - \left(\frac{1}{2} + \frac{5}{4M^2}\right) \operatorname{erfc}(M)\right] \tag{IV.4}$$

En égalant l'invariant intégral du flux énergétique aux deux frontières (équations (IV.2) et (IV.4)), on obtient :

$$\boxed{\begin{aligned}
n_b u_b^3 \left(\frac{5}{2M^2} + 1\right) = &\frac{n_a}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_B T_a}{m}\right)^{3/2} \\
&- \beta n_b u_b^3 \left[\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{M^2}\right) \frac{e^{-M^2}}{M\sqrt{\pi}} - \left(\frac{1}{2} + \frac{5}{4M^2}\right) \operatorname{erfc}(M)\right]
\end{aligned}}$$

Soulignons que cette dernière équation n'est pas la même que celle trouvée par Anisimov (1968) ; une erreur s'est probablement glissée lors de la rédaction de l'article. Celle-ci est cependant identique à celle utilisée par Keidar *et al.* (2001) et, contrairement à ce que prétend Zaghloul (2004), aucune généralisation n'a été faite quant à la valeur de γ.