



Utilisation de la Méthode de Monte Carlo pour l'Étude d'Une Décharge Électrique dans l'Oxygène.

Leyla ZEGHICHI⁽¹⁾, Leïla MOKHNACHE⁽²⁾, and Mebarek DJEBABRA⁽³⁾

⁽¹⁾ Dept. des sciences de la nature et de la vie, université d'Ouargla, Ouargla, Algérie

⁽²⁾ Dept. de génie électrique, université de Batna, Batna, Algérie

⁽³⁾ Institut d'hygiène et sécurité, université de Batna, Batna, Algérie

leylazeghichi@yahoo.fr, lmokhnache@yahoo.fr, djebabra_mebarek@yahoo.fr

Résumé— Le but de cette étude est de présenter la contribution de la méthode de Monte Carlo pour imiter les phénomènes de base dans une décharge électrique, en tenant compte des différents processus de collisions atomiques (élastique ou inélastique) et cela dans le cas de l'Oxygène.

Mots clés — Champ électrique; Le libre temps moyen de vol; Probabilité de collision; Type de collision; Méthode de Monte Carlo ; paramètres de transport.

I. INTRODUCTION

Sous l'effet des agents ionisants naturels ou artificiels (UV, X et γ), les gaz peuvent perdre leurs propriétés diélectriques et devenir plus ou moins conducteurs. Cette perte de propriétés (ionisation) se traduit par la dissociation de molécules neutres en électrons et en ions. En présence d'un champ électrique entre les électrodes (planes et parallèles), l'apparition des particules chargées (en augmentation) donne naissance au champ de charge d'espace. La présence d'un champ dans l'espace inter électrode peut donner lieu, selon le niveau de tension appliquée aux électrodes, à une décharge de type non autonome ou autonome [1, 4]. On parle de décharge électrique pour décrire tout mécanisme de passage du courant dans un gaz [5].

La décharge de gaz est un phénomène important dans la génération des plasmas de décharge ainsi que l'isolation en haute tension électrique. Le mécanisme de la décharge électrique est entièrement expliqué par des collisions des électrons accélérés par le champ appliqué avec les molécules qui constituent le gaz [6].

Lorsque l'ionisation est assez importante pour que le nombre d'électrons par unité de volume soit comparable à celui des molécules neutres, le gaz, devenu plasma, est un fluide très conducteur.

L'estimation des paramètres électriques et physiques d'une décharge électrique est d'une grande importance du moment qu'ils constituent un lien entre les processus élémentaires de collision et le phénomène de la décharge électrique [7, 8].

La Méthode de Monte Carlo (MMC) est aujourd'hui la technique la plus robuste et est couramment utilisées pour l'analyse des problèmes complexes. Ces applications peuvent être constatées dans de nombreux domaines.

Récemment, la gamme d'applications a été élargie, et la complexité et l'effort de calcul nécessaire a augmenté, parce que le réalisme est associé à des descriptions du problème plus complexe et extensive [9]. La MMC est la méthode qui permet de décrire les phénomènes de collision dans la décharge d'une manière statistique. Celle-ci est, mathématiquement, très simple [10] : un modèle décrivant le système, un générateur de variables aléatoires et des lois d'échantillonnage pour la détermination des paramètres essentiels de la décharge électrique.

Le développement de la décharge a été étudié par le biais de cette méthode ; un grand nombre de particules chargées sont suivies et les paramètres caractérisant sont obtenus. Les concepts physiques de la MMC, qui peuvent être appliquée à l'étude d'une décharge électrique, sont [11] : le temps moyen de vol, le libre parcours moyen ou la technique de collision nulle.

Les paramètres physiques des molécules qui composent le gaz étudié tels que la section efficace de collision, la probabilité de collision, et l'énergie de collision, sont utilisés pour obtenir les paramètres de l'avalanche électronique (valeurs moyennes d'énergie, et les coefficients d'ionisation et d'attachement) et d'étudier son évolution.

Dans ce travail la MMC est de utilisée pour étudier et analyser les processus fondamentaux dans une décharge électrique, dans l'oxygène, en prenant en considération les différents processus de collisions atomiques (élastique ou inélastique).

II. METHODE DE SIMULATION

La MMC s'appuie sur la simulation des phénomènes de collision des électrons avec les molécules constituant le gaz. Cela se fait par le suivi des historiques d'un grand nombre d'électrons, l'un après l'autre. Par la moyenne de ces historiques, de différentes propriétés peuvent être estimées.

A. Le modèle

Nous avons utilisé le concept de la simulation à pas constant où la décision de collision pour chaque électron dans un pas du temps dt est faite par comparaison d'un nombre aléatoire avec la probabilité de cette collision P_I (issue de densité de distribution de poisson).

$$P_1 = 1 - \exp\left(-\frac{dt}{T_m}\right) \quad (1)$$

Où T_m : est libre temps moyen de vol.

Les collisions sont traitées en utilisant des nombres aléatoires [6]. L'intervalle $[0, P_1]$ est divisé en segments de longueurs qui correspondent aux probabilités des différents types de collision après ordonnancement croissant de ces probabilités. Le reste une portion d'intervalle dans le cas où aucune collision n'est possible. Pour déterminer le type de la collision, nous calculons les probabilités partielles en divisant les sections efficaces des différents types de collision sur la section efficace totale [12], celles-ci sont données par [13].

Les trajectoires des électrons sont calculées avec les lois de Newton :

$$\begin{aligned} v_{x0}(i) &= v_0 \sin(\theta(i)) \cos(\varphi(i)) \\ v_{y0}(i) &= v_0 \cos(\theta(i)) \sin(\varphi(i)) \\ v_{z0}(i) &= v_0 \cos(\theta(i)) \end{aligned} \quad (2)$$

L'angle de déviation θ et l'azimutal φ sont choisis aléatoirement pour chaque électron suivant une distribution sinusoïdale [Abd99].

$$\cos(\theta) = 1 - 2r_1 \quad (3)$$

$$\cos(\varphi) = 1 - 2r_2 \quad (4)$$

B. L'algorithme de la simulation

1. Calcul du libre temps moyen de vol
2. Réalisation d'une boucle de 10^3 pour refaire N fois le temps max
3. Calcul du pas du temps .Le temps de vol actuel est calculé pour tous les électrons de l'échantillon
4. Génération des électrons initiaux ($N_e = 10^3$)
5. Simulation de la vitesse et la position de chaque électron.
6. calcul des nouvelles composantes de la vitesse Après un temps de vol et sous l'effet du champ électrique,
7. Détermination du gain d'énergie (équation (IV.9)).
8. Détermination du type de la collision : calcul de la probabilité de collision (équation (IV.22)) et comparaison du nombre aléatoire avec les probabilités des différents types de collision :
 - 8.1. si c'est de l'Attachement : $N_e = N_e - I$,
 - 8.2. si c'est de l'ionisation : $N_e = N_e + I$,
 - 8.3. Collision élastique excitation : aucune particule n'est produite ni disparue.
 - 8.4. pas de collision, aller en (9. électron suivant).
9. Détermination des paramètres de l'électron après la collision (énergie et vitesse)
10. (électron suivant)
11. Calcul des paramètres macroscopique de la décharge

12. Si $T < T_{max}$, incrémenter le temps $T = T + dt$ réinitialiser le générateur et aller en (4.) si l'un des critères de claquage est vérifié aller en (14.)
13. Si le nombre max d'histoires est atteint aller en (13.) sinon aller en (2.)
14. Traitement statistique (calcul des moyennes)

C. Les lois d'échantillonnage

Pendant les collisions successives des électrons et des particules, certaines valeurs (l'énergie de l'électron, sa position, le nombre d'ions positifs et négatifs, etc.) sont stockées afin de calculer les paramètres physique de la décharge électrique (taux d'ionisation, taux d'attachement, vitesse de dérive et énergie cinétique moyenne). En prenant la moyenne des postions, on peut déterminer les paramètres de transport et les paramètres des particules chargées \bar{z} .

$$\bar{z} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N z(i) \quad (5)$$

III. SIMULATION ET RESULTATS

La MMC est utilisée pour la simulation un grand nombre d'évènements (mouvement des électrons par un autre ensemble facilement réalisable (variables aléatoires) ; elle est aussi et collision particules chargées). Elle porte sur le suivi des historiques de chaque électron dès son émission jusqu'à sa disparition [14]. Ces électrons peuvent être soit émis par une cathode chaude, soit arrachés aux atomes de gaz. Par la moyenne des historiques de ces électrons, les taux d'ionisation et d'attachement l'énergie cinétique moyenne sont déterminées.

Les figures (Fig. 1, Fig. 2 et Fig 3) représentent, respectivement, la variation en fonction du temps des taux d'ionisation, d'attachement et de l'énergie cinétique moyenne pour le gaz d'oxygène O₂ à une pression de 1 torr, une température de 293°K (20°C).

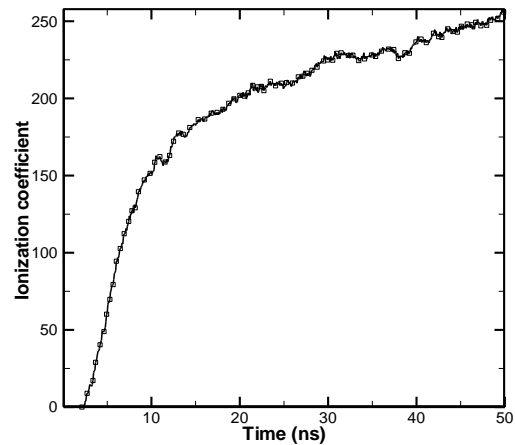


Fig. 1 La variation temporelle du taux d'ionisation pour P=1torr et E₀=10 kV/m.

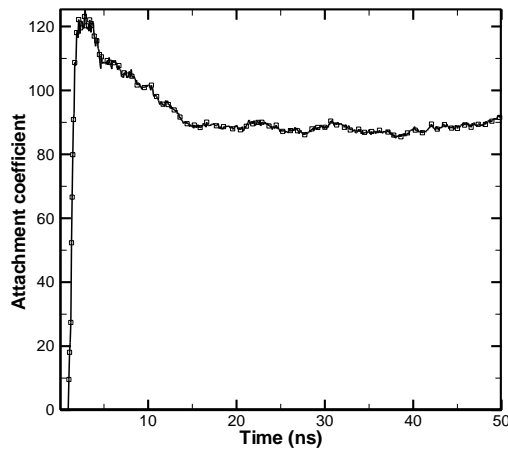


Fig. 2 La variation temporelle du taux d'attachement pour $P=1$ torr et $E_0=10$ kV/m.

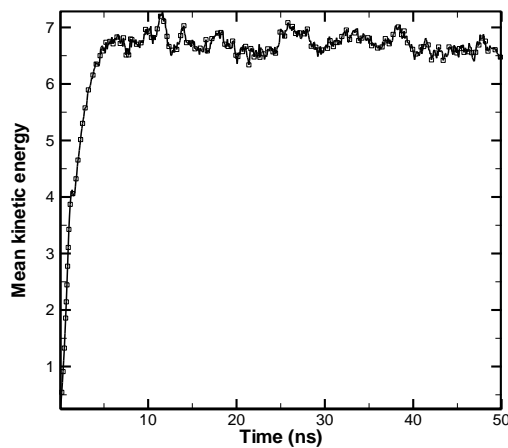


Fig. 3 La variation temporelle de l'énergie cinétique moyenne pour $P=1$ torr et $E_0=10$ kV/m.

Les électrons sont accélérés par le champ électrique, ils acquièrent suffisamment d'énergie, sous l'effet de la force électrique $-eE$, pour provoquer l'ionisation lors de leurs collisions avec les molécules du gaz rencontrées dans leur chemin. Comme l'énergie cinétique moyenne croît avec le temps (Fig.3), la probabilité d'ionisation augmente et par conséquent le coefficient d'ionisation α augmente (Fig. 1). D'autre part le taux d'attachement décroît avec le temps (Fig. 2) et ce à cause de l'augmentation de l'énergie cinétique ce qui diminue la probabilité d'attachement devant la probabilité d'ionisation.

Pour mieux comprendre le développement d'une décharge électrique sous l'effet de la tension appliquée, nous avons suivi la variation des paramètres macroscopiques pour différentes valeurs de la tension allant de (50 à 300 V) pour

le gaz d'oxygène O_2 à une pression de 1 torr, une température de 293°K (20°C).

Obtenues par la SMC, les valeurs des coefficients macroscopiques suivants : le taux d'ionisation, le taux d'attachement, la vitesse de dérive et l'énergie moyenne sont rassemblées dans le tableau ci-dessous

Tab. 1 Valeurs des coefficients macroscopiques pour différentes valeurs de la tension appliquée

$V(V)$	$\alpha(m^{-1})$	$\eta(m^{-1})$	$\bar{\varepsilon}(ev)$
50	1.20	7.13	6.22
100	23.70	6.60	8.28
150	82.04	6.14	13.40
190	91.16	4.78	21.25
300	151.06	8.26E-01	28.79

Du tableau (Tab.1), on peut remarquer qu'en augmentant le champ électrique l'énergie cinétique moyenne augmente et par conséquent, nous avons une augmentation de la probabilité d'ionisation. Par contre, la probabilité d'attachement diminue ce qui justifie la décroissance du taux d'attachement.

IV. CONCLUSION

Dans ce papier nous avons utilisé la méthode de Monte Carlo pour décrire le comportement d'un grand nombre sous l'effet des champs électriques uniformes.

Parmi les résultats obtenus de cette application, nous citons l'augmentation du taux d'ionisation et de l'énergie cinétique moyenne suivant la loi exponentielle au fur et à mesure que les électrons avancent dans la direction du champ. Par contre, le taux d'attachement et la vitesse de dérive ont connu des diminutions.

Sous l'effet de la tension électrique appliquée, la variation des paramètres macroscopiques pour différentes valeurs de la tension électrique appliquée a été étudiée aussi.

REFERENCES

- [1] J. M. Meek, J. D. Craggs, *Electrical breakdown of gases*. Oxford: Clarendon Press, 1953.
- [2] E. Kuffel, W. S. Zaengl and J. Kuffel, *High voltage engineering fundamentals*, 2nd ed. Butterworth-Heinemann, 2000, 534p.
- [3] G. G. Raju, *Dielectrics in electric field*. Marcel Dekker, New York: CRC Press, 2003.
- [4] A. Settaouti and L. Settaouti, "Monte Carlo simulation of electron swarm parameters in O_2 ," *Eur. Phys. J. Appl. Phys*(37), 2007, pp. 335-341.
- [5] Y. R. Raizer, *Gas discharge physics*, Berlin: Springer-Verlag, 1991.
- [6] M. S. Naidu, *High voltage engineering*, 2nd ed. New York: Quebecor/Book Press, 1995.
- [7] G. R. Govinda Raju and J. Liu. "Simulation of Electrical Discharges in Gases- Uniform Electric Fields". *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, vol 2 (5), pp. 1004-1015, 1995.



The INTERNATIONAL CONFERENCE ON ELECTRONICS & OIL: FROM THEORY TO APPLICATIONS

March 05-06, 2013, Ouargla, Algeria



- [8] G. S. Fishman, *Monte Carlo Concepts, Algorithms, and Applications* 2nd ed. (S.-V. N. Inc, Ed.)
- [9] J. Liu and G. R. Govinda Raju. (). Simulation of Corona Discharge Positive Corona in SF6. *IEEE transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, Vol. 1 No. 3, pp. 530-537. canada. 1994
- [10] G. A. P CASTANEDA, "Evaluation par simulation de sûreté de fonctionnement des systèmes en contexte dynamique hybride", Thèse de doctorat de l'Institut national polytechnique de Lorraine. Université de Nancy, 2009.
- [11] G. R. Govinda Raju and J. Liu. "Simulation of Electrical Discharges in Gases– Non Uniform Electric Fields". *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation*, vol 2 (5), pp. 1004-1015, 1995.
- [12] A. Settaouti, L. Settaouti. "Numerical simulation of corona discharge in N2". *Journal of Electrostatics* (65),pp. 625–630, 2007.
- [13] A. V. Phelps, *Atomic & Molecular Physics*. 2005, may 20 Retrieved from JILA NITCU:
http://jilawww.colorado.edu/~avp/collision_data/readme.txt
- [14] B. Djillali et B. Bachir. " Etude d'une décharge luminescente continue dans l'argon Par la méthode de Monte Carlo ". *CNHT'2003 – 5ème Conférence sur la Haute Tension – USTMB*, (pp. 61-66). oran. 2003.