

Dérivation de modèles couplés dérive-diffusion/cinétique par une méthode de décomposition en vitesse

Nicolas Crouseilles

UMR, MIP, Université Paul Sabatier, 118, route de Narbonne 31062 Toulouse cedex, France

Reçu le 20 juillet 2001 ; accepté après révision le 4 février 2002

Note présentée par Henri Cabannes.

Résumé

Dans cette Note, nous proposons un modèle permettant de décrire différemment l'évolution de particules chargées dans un plasma suivant leurs énergies cinétiques. Les particules rapides seront décrites par une équation cinétique collisionnelle de type Boltzmann. Cette dernière sera couplée à un modèle macroscopique de type dérive-diffusion destiné à modéliser l'évolution des particules lentes. Un des intérêts de ce type d'approche est la réduction du coût des simulations numériques. Ce gain est dû à l'utilisation d'un modèle macroscopique au lieu d'un modèle cinétique pour la totalité des particules, qui mettrait en jeu un nombre de variables beaucoup plus grand. *Pour citer cet article : N. Crouseilles, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 334 (2002) 827–832.* © 2002 Académie des sciences/Éditions scientifiques et médicales Elsevier SAS

Derivation of a kinetic/drift-diffusion model describing fast and slow particles

Abstract

Our purpose is to derive a model describing the evolution of charged particles in a plasma, at various scales following their kinetic energy. Fast particles will be described through a collisional kinetic equation of Boltzmann type. This equation will be coupled with a drift-diffusion model that describes the evolution of slower particles. The main interest of this approach is to reduce the cost of numerical simulations. This gain is due to the use of a macroscopic model for slow particles instead of a kinetic model for all the particles, which would involve a larger number of variables. *To cite this article: N. Crouseilles, C. R. Acad. Sci. Paris, Ser. I 334 (2002) 827–832.* © 2002 Académie des sciences/Éditions scientifiques et médicales Elsevier SAS

Abridged English version

The Boltzmann equation is used to describe the evolution of colliding particles. If $f(t, x, v)$ is the distribution function of particles, and ϕ is a given space depending electric potential, then we consider the Boltzmann-like equation given by (1.2) and (1.3).

Adresse e-mail : crouseilles@mip.ups-tlse.fr (N. Crouseilles).

The resolution of such an equation takes into account seven dimensions (time, space and velocity). Therefore, a numerical simulation of this kinetic equation requires a prohibitive cost, and the use of macroscopic models (involving a smaller number of variables) is necessary. However, these macroscopic models could also be unsatisfactory from a physical point of view. In this work, we propose a hybrid model taking into account both the kinetic and the macroscopic scales.

Our strategy is to describe differently the two kinds of particles in the plasma: fast particles and slow particles. Slow particles will be described through a macroscopic model such as drift-diffusion one. Instead, the fast particles need a more precise modelling and will be described by a collisional kinetic equation of Boltzmann type. We then obtain a coupled kinetic/drift-diffusion model. This model seems to be a good compromise between precise models such as the kinetic ones and macroscopic models that have a reduced numerical cost.

Such descriptions naturally need to take into account boundary conditions that correspond to the exchange of particles between the sets of slow and fast particles. In this work, we show that these boundary conditions can be avoided by overlapping the two zones. Indeed, we introduce a buffer zone where macroscopic and kinetic zones overlap. More precisely, if B_r is the ball of radius $r > 0$, we introduce a regular and compactly supported function of the energy, $h = h(|v|^2/2)$, which takes the value 1 on B_a , 0 on $\mathbb{R}^d - B_b$ (where $b > a$). All the exchanges of particles between the two zones are confined in this buffer zone.

Finally, we propose some particular cases and justify rigorously the derivation of the macroscopic part of the model. This mathematical study is only performed on a slightly modified setting.

1. Introduction

Nous étudions dans cette Note un modèle cinétique collisionnel utilisé pour décrire l'évolution de particules chargées. Ce modèle est décrit par une équation de type Boltzmann qui comporte comme second membre un opérateur de collision linéaire décrivant les collisions entre les électrons et les ions massifs, supposés immobiles. En posant :

$$E = \frac{|v|^2}{2} + \phi \quad \text{et} \quad T_E = \nabla_v E \cdot \nabla_x - \nabla_x E \cdot \nabla_v, \tag{1.1}$$

où ϕ est un potentiel électrique donné ne dépendant que de la variable d'espace, l'équation de type Boltzmann adimensionnée s'écrit :

$$\frac{\partial f^\varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} T_E f^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} Q(f^\varepsilon), \tag{1.2}$$

où $Q(f)$ est le noyau de collision donné par l'expression suivante :

$$Q(f) = \int_{\mathbb{R}^d} S(v, v_\star) (M f_\star - M_\star f) dv_\star, \tag{1.3}$$

avec S une section efficace de collision, M une maxwellienne ($M = (2\pi T)^{-d/2} e^{-|v|^2/(2T)}$), T la température supposée constante, et $f = f(t, x, v)$ est la fonction de distribution des électrons dans le plasma, dépendant du temps $t \in \mathbb{R}_+$, de $x \in \mathbb{R}^d$, et de $v \in \mathbb{R}^d$. Enfin, on rappelle les notations habituelles $f = f(v)$, $f_\star = f(v_\star)$.

Cette description étant trop coûteuse numériquement (elle prend en compte $2d + 1$ variables), nous nous proposons de décrire différemment les particules rapides et les particules lentes. Ces dernières seront

traitées dans un modèle macroscopique de type dérive-diffusion tandis qu'un modèle cinétique tentera de décrire plus précisément les particules rapides. Pour cela, nous considérerons une zone tampon où les deux régimes sont pris en compte, et où tous les échanges de particules seront supposés s'effectuer.

Après avoir donné l'expression du modèle couplé obtenu par cette approche, une modification de notre approche nous permettra de justifier rigoureusement l'obtention de modèles associés à cette approche modifiée.

2. Obtention du modèle couplé

Considérons deux boules B_a et B_b de rayon a et b , ainsi qu'une fonction $h = h(|v|^2/2)$ à support compact B_b qui vaut 1 sur B_a , 0 sur $\mathbb{R}^d - B_b$ et qui est régulière monotone sur la zone tampon $B_b - B_a$ (avec $b > a$). On note \mathbb{S}_r la sphère de centre 0 et de rayon $r > 0$. L'objectif est d'obtenir un modèle couplé macroscopique/cinétique d'inconnues (n_L, f_R) où n_L est la densité des particules lentes (inconnue macroscopique) tandis que f_R représente la fonction de distribution des particules rapides (inconnue microscopique).

PROPOSITION 2.1. – Soient f_L et f_R des solutions du système couplé suivant :

$$\varepsilon^2 \frac{\partial f_L}{\partial t} + \varepsilon T_{E_L} f_L = Q_{LL}(f_L) + Q_{LR}(f_L, f_R) - \varepsilon T_{E_L} f_R \quad \text{sur } B_b, \quad (2.1)$$

$$\varepsilon^2 \frac{\partial f_R}{\partial t} + \varepsilon T_{E_R} f_R = Q_{RR}(f_R) + Q_{RL}(f_R, f_L) - \varepsilon T_{E_R} f_L \quad \text{sur } \mathbb{R}^d - B_a, \quad (2.2)$$

où $E_L = hE$, $E_R = (1 - h)E$, T_{E_L} et T_{E_R} sont donnés par (1.1), et :

$$\begin{aligned} Q_{LL}(f_L) &= \int S(v, v_*) (Mh f_{L*} - M_* h_* f_L) dv_*, \\ Q_{RR}(f_R) &= \int S(v, v_*) (M(1-h) f_{R*} - M_*(1-h_*) f_R) dv_*, \\ Q_{LR}(f_L, f_R) &= \int S(v, v_*) (Mh f_{R*} - M_*(1-h_*) f_L) dv_*, \\ Q_{RL}(f_R, f_L) &= \int S(v, v_*) (M(1-h) f_{L*} - M_* h_* f_R) dv_*. \end{aligned}$$

Alors, on a : $f_L + f_R$ est une solution de l'équation de type Boltzmann (1.2), (1.3).

Démonstration. – L'équation (2.1) (munie d'une condition initiale à $t = 0$) est bien posée sur B_b car $T_{E_L} f_L$ est dégénéré au voisinage de \mathbb{S}_b . Il en est de même pour (2.2). En additionnant les deux équations (2.1), (2.2), $f_L + f_R$ est une solution de (1.2), (1.3). \square

Le but est d'obtenir un modèle hybride dérive-diffusion/cinétique; nous nous proposons donc de dériver un modèle macroscopique à partir de (2.1), qui sera couplé avec (2.2). Pour cela, notons \tilde{f}_L la solution approchée à $O(\varepsilon)$ près de (2.1); on considère \tilde{f}_L comme une approximation de l'équilibre thermodynamique local, et introduisons son développement de Hilbert [3] :

$$\tilde{f}_L = f_L^0 + \varepsilon f_L^1, \quad \text{avec } f_L^0 = n_L \frac{hM}{\int_{B_b} hM dv} \quad \text{et } n_L = \int_{B_b} \tilde{f}_L dv. \quad (2.3)$$

On note \tilde{f}_R une solution exacte de (2.2) avec f_L remplacé par \tilde{f}_L dans les termes de couplage Q_{RL} et T_{E_R} . De plus, nous supposerons les particules rapides (modélisées par \tilde{f}_R) peu nombreuses, ainsi les termes de couplage de (2.1) (c'est-à-dire Q_{LR} et εT_{E_L}) seront considérés comme des $O(\varepsilon^2)$. Avant d'écrire le système final, rappelons quelques propriétés de Q_{LL} :

PROPOSITION 2.2. – Soit $Q_{LL}(F)(v) = \int_{B_b} S(v, v_\star)(MhF_\star - M_\star h_\star F) dv_\star$. On suppose que :

$$S_1 \geq S \geq S_0 > 0.$$

Sur $L^2_{hM} = \{f \text{ mesurable telle que } \int_{B_b} f^2 \frac{dv}{hM} < +\infty\}$, Q_{LL} a les propriétés suivantes :

- (i) Q_{LL} est borné, auto-adjoint et négatif.
- (ii) L'espace annulateur de Q_{LL} , $N(Q_{LL})$ s'écrit $N(Q_{LL}) = \{c h M, \text{ où } c = c(x, t)\}$, et l'image de Q_{LL} s'écrit $R(Q_{LL}) = N(Q_{LL})^\perp = \{f \in L^2_{hM} \text{ tel que } \int_{B_b} f dv = 0\}$.
- (iii) $-Q_{LL}$ est coercif sur $N(Q_{LL})^\perp = R(Q_{LL})$, c'est-à-dire qu'il existe $\alpha > 0$ tel que :

$$-\int_{B_b} Q_{LL}(F)F \frac{dv}{hM} \geq \alpha \int_{B_b} F^2 \frac{dv}{hM}, \quad \forall F \in R(Q_{LL}).$$

Pour une démonstration de ce type de résultat, nous référons le lecteur à [5].

PROPOSITION 2.3. – Les fonctions $(\tilde{f}_L = n_L(hM / \int_{B_b} hM dv) + \varepsilon f_L^1, \tilde{f}_R)$ sont des solutions approchées du système (2.1), (2.2) à l'ordre 1 en ε si et seulement si (n_L, \tilde{f}_R) est solution à l'ordre 1 en ε du système hybride suivant :

$$\frac{\partial n_L}{\partial t} + \nabla_x \cdot j_L = -\frac{1}{\varepsilon} \int_{B_b} T_{E_L} \tilde{f}_R dv + \frac{1}{\varepsilon^2} \iint_{B_b \times B_b} S(v, v_\star) \left(Mh \tilde{f}_{R_\star} - M_\star (1 - h_\star) n_L \frac{hM}{\int_{B_b} hM dv} \right) dv_\star dv,$$

avec $j_L = -D_1(\phi \nabla_x n_L - n_L \nabla_x \phi) - D_2 \nabla_x n_L - D_3 \nabla_x \phi \frac{n_L}{T}$,

où

$$D_i = \frac{1}{\int_{B_b} hM dv} \int_{B_b} (h'E + h)v \otimes \lambda_i dv, \quad i = 1, 2, 3,$$

$$\lambda_1 = -Q_{LL}^{-1}(vhh'M), \quad \lambda_2 = -Q_{LL}^{-1}\left(vhM\left(h + h'\frac{|v|^2}{2}\right)\right), \quad \lambda_3 = -Q_{LL}^{-1}(vh^2M),$$

$$\frac{\partial \tilde{f}_R}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} T_{E_R} \tilde{f}_R = \frac{1}{\varepsilon^2} Q_{RR}(\tilde{f}_R) + \frac{1}{\varepsilon^2} Q_{RL}(\tilde{f}_R, f_L^0 + \varepsilon f_L^1) - \frac{1}{\varepsilon} T_{E_R}(f_L^0 + \varepsilon f_L^1),$$

avec

$$f_L^0 = n_L \frac{hM}{\int_{B_b} hM dv},$$

$$f_L^1 = -\frac{1}{\int_{B_b} hM dv} \left[(\phi \nabla_x n_L - n_L \nabla_x \phi) \cdot \lambda_1 + \nabla_x n_L \cdot \lambda_2 + \nabla_x \phi \frac{n_L}{T} \cdot \lambda_3 \right]. \quad (2.4)$$

Démonstration. – Nous référons le lecteur à [2] et [4] pour ce type de preuve. On injecte (2.3) dans (2.1) ; on utilise le fait que Q_{LR} et εT_{E_L} sont des $O(\varepsilon^2)$ et que $Q_{LL}(f_L^0) = 0$, on obtient après avoir intégré sur B_b :

$$\int_{B_b} \left(\frac{\partial f_L^0}{\partial t} + \varepsilon \frac{\partial f_L^1}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} T_{E_L} f_L^0 + T_{E_L} f_L^1 + \frac{1}{\varepsilon} T_{E_L} \tilde{f}_R - \frac{1}{\varepsilon^2} Q_{LR}(f_L^0, \tilde{f}_R) \right) dv = O(\varepsilon). \quad (2.5)$$

En reprenant (2.1) avec (2.3), et comme $f_L^1 \in R(Q_{LL})$, on obtient :

$$f_L^1 = Q_{LL}^{-1}(T_{E_L} f_L^0) + O(\varepsilon). \quad (2.6)$$

En reportant (2.6) dans (2.5), et en négligeant les termes d'ordre 1 en ε , on obtient l'équation sur n_L en ayant posé $j_L(t, x) = \int_{B_b} T_{E_L} f_L^1 dv$. \square

Remarque 2.4. – Lorsqu'on considère une section constante $S = \nu$, où ν est la fréquence de collisions, le système obtenu et les formules sont plus simples que dans (2.4). En particulier, l'expression du courant devient : $j_L = -D_1 \nabla_x n_L - D_2 n_L \nabla_x \phi$, où D_1 et D_2 sont des coefficients de diffusion :

$$D_1 = \frac{1}{d} \int_{B_b} |v|^2 \frac{Mh(h'E + h)^2}{(\int_{B_b} Mh dv)^2} dv \quad \text{et} \quad D_2 = \frac{1}{d} \int_{B_b} |v|^2 \frac{hM(h'E + h)}{(\int_{B_b} Mh dv)^2} \left(\frac{h}{T} - h' \right) dv.$$

Nous allons maintenant nous focaliser sur la justification rigoureuse du passage à la limite $\varepsilon \rightarrow 0$ pour obtenir le modèle de dérive-diffusion. Pour simplifier, nous considérons l'équation suivante (où l'on a négligé les termes de couplage) :

$$\frac{\partial f_L^\varepsilon}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} T_{E_L} f_L^\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon^2} Q_{LL}(f_L^\varepsilon), \tag{2.7}$$

où les expressions de T_{E_L} et Q_{LL} sont données par (1.1). Les difficultés techniques rencontrées dans le cas où $h = h(|v|^2/2)$ sont liées au fait que le noyau de T_{E_L} (c'est-à-dire les fonctions de E_L) est différent de celui de l'opérateur de collision (les fonctions hM). Donc, si on choisit une fonction h dépendant de $E = |v|^2/2 + \phi$ au lieu de $|v|^2/2$ uniquement, alors la limite quand $\varepsilon \rightarrow 0$ peut être rigoureusement traitée exactement de la même manière que dans le cas standard $h = 1$. Mais il faut noter que cette nouvelle décomposition est faite selon l'énergie totale ($|v|^2/2 + \phi$), alors que le découpage qui nous intéresse (et qui est physiquement plus acceptable) doit être fait selon l'énergie cinétique. Cependant, considérons la fonction $h := h(|v|^2/2 + \phi(x))$ et introduisons les espaces à poids suivants :

$$\mathcal{H} = \left\{ f \text{ mesurable} \mid \iint_{\mathbb{R}^d \times B_b} f^2 \frac{e^{(\phi/T)}}{hM} dx dv < +\infty \right\},$$

$$L_\phi^2 = \left\{ f \text{ mesurable} \mid \int_{\mathbb{R}^d} f^2 e^{(\phi/T)} dx < +\infty \right\}.$$

pour énoncer le théorème :

THÉORÈME 2.5. – *Pour toute suite (f_L^ε) de solution de (2.7), il existe une sous-suite renotée (f_L^ε) et $f_L \in L^\infty(0, T; \mathcal{H})$ telles que :*

$$f_L^\varepsilon \rightharpoonup f_L \quad \text{dans } L^\infty(0, T; \mathcal{H}) \text{ faible } *.$$

De plus,

$$f_L = n_L(x, t) \frac{hM}{\int_{B_b} hM dv}, \quad \text{où } n_L \in L^\infty(0, T; L_\phi^2). \tag{2.8}$$

3. Conclusion

La réduction du coût des simulations numériques, par l'utilisation du modèle macroscopique pour les particules lentes et l'absence de conditions au bord, est le principal intérêt de notre approche. Les applications de ce genre de modèles se situent dans le domaine de la physique des semi-conducteurs pour décrire des phénomènes d'ionisation par impact à haute énergie [1,6] ; la fonction de distribution n'est alors pas une maxwellienne. La modélisation de l'évolution des électrons suprathermiques lors de la fusion par confinement inertiel (C.F.I.) peut également être traitée par de tels modèles. Par ailleurs, une extension de

notre approche à la dérivation d'un modèle fluide de type Euler pour modéliser les particules lentes est en cours. Cependant, l'efficacité de ces méthodes ne sera prouvée qu'après une validation par des tests numériques pertinents. Ceci fait l'objet d'un travail ultérieur.

Références bibliographiques

- [1] J. Ahn, C. Yao, H. Min, R. Dutton, Impact ionization modelling using simulation of high energy tail distributions, *IEEE Electron Device Lett.* 15 (9) (1994) 348–350.
- [2] N. Ben Abdallah, P. Degond, On a hierarchy of macroscopic models for semiconductors, *J. Math. Phys.* 37 (1997) 3306–3333.
- [3] S. Chapman, T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge University Press, New York, 1958.
- [4] P. Degond, Mathematical modeling of microelectronics semiconductor devices, in: *AMS/IP Studies in Adv. Math.*, Vol. 15, AMS and International Press, 2000, pp. 77–110.
- [5] F. Poupaud, Diffusion approximation of the linear semiconductor equation: analysis of boundary layers, *Asymptotic Anal.* 4 (1991) 293–317.
- [6] P. Scrobahaci, T. Tang, Modeling of the hot electron subpopulation and its application to impact ionization in submicron silicon devices, *IEEE Trans. Electron Devices* 41 (7) (1994) 1197–1212.