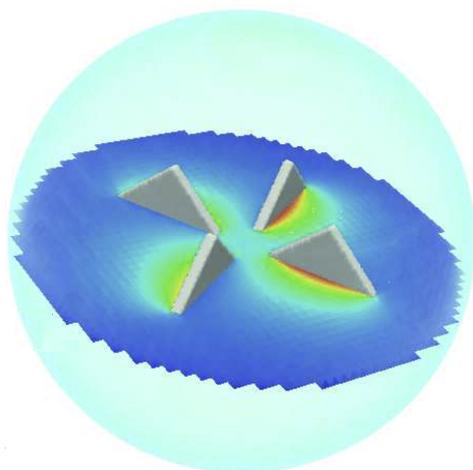


Transport de particules : modèles, simulations, et applications

Notes de cours
(version provisoire du 17 octobre 2020)

Partie 1 : théorie cinétique des gaz



Luc Mieussens

Bordeaux INP (ENSEIRB-MATMECA)
et
Institut de Mathématiques de Bordeaux

Avant propos

La théorie cinétique permet de décrire l'évolution d'un système de particules définies par leurs positions et leurs vitesses (d'où le terme "cinétique"). Cette théorie a été développée avec succès au XIXe siècle, pour l'essentiel par Maxwell et Boltzmann, pour modéliser les gaz en les considérant comme un ensemble de molécules. Malgré ses nombreux succès, la théorie cinétique des gaz a été un peu reléguée au second plan au début du XXe siècle, puis elle a connu une renaissance dans les années 1950 quand Chandrasekhar l'a appliquée à la théorie du rayonnement, ou transfert radiatif, qui décrit la propagation des photons dans un milieu. Le développement de l'ingénierie nucléaire a ensuite vu la théorie cinétique se développer de façon considérable pour modéliser le transport des neutrons dans un réacteur. C'est encore aujourd'hui le domaine dans lequel la théorie cinétique est la plus utilisée.

La théorie cinétique des gaz est quant à elle suscitée un nouvel intérêt dans les années 1980 pour des études d'aérodynamique, avec le problème de la rentrée atmosphérique (quand une capsule ou une navette rentre dans l'atmosphère avec une vitesse extrêmement grande). Encore plus récemment, l'industrie des pompes à vide et celle des micro-systèmes électromécaniques ont suscité de nouvelles recherches en théorie cinétique des gaz.

D'autres domaines de la physique utilisent cette théorie, comme la physique des plasmas, où la théorie cinétique peut servir à décrire l'évolution d'un ensemble de particules chargées, ou la physique des semi-conducteurs, où les particules modélisées sont alors des électrons, ou encore l'ingénierie de la combustion, où les particules sont les gouttelettes de carburant injectées dans la chambre de combustion.

Depuis quelques années, la théorie cinétique se voit appliquée à un grand nombre de problèmes issus de la biologie, de la médecine, ou de l'étude du comportement humain. Citons par exemple la modélisation des mouvements de grands ensembles d'animaux (vols d'oiseaux, bancs de poissons, colonies de fourmis), de mouvement d'amas de cellules, du déplacement de foules humaines, du trafic routier, etc. Les particules de la théorie cinétique sont ici des individus (animaux, cellules, personnes, voitures) animés de mouvement individuels donnant naissance à un mouvement collectif.

La théorie cinétique a donc un champ d'application extrêmement vaste. L'objet de ce cours n'est évidemment pas de traiter tous ces exemples en détail. Au contraire, nous nous concentrerons principalement sur deux domaines particuliers que sont la théorie cinétique des gaz et le transfert radiatif. Cependant, afin d'illustrer la variété de problèmes qui peuvent bénéficier de la théorie cinétique, nous ferons même une rapide incursion en océanographie en montrant comment la théorie cinétique peut être utilisée pour modéliser l'effet de la pluie sur les vagues ou le transport des embruns. Enfin, nous montrerons comment cette théorie peut être utilisée pour obtenir une méthode numérique performante pour la simulation de écoulements incompressibles : la méthode "Boltzmann sur réseau".

Première partie
Théorie cinétique des gaz

Table des matières

I	Théorie cinétique des gaz	5
1	Descriptions microscopique / macroscopique d'un gaz	9
1.1	Description moléculaire d'un gaz monoatomique	9
1.2	Description macroscopique	10
2	Description cinétique	13
2.1	Fonction de distribution	13
2.2	Quantités macroscopiques	13
2.3	Distribution à l'équilibre	15
2.4	Quelle description utiliser?	15
3	Calcul cinétique de la pression	19
4	Flux	23
4.1	Flux de masse	23
4.2	Flux d'impulsion, tenseur des contraintes	25
4.3	Flux de chaleur	26
5	Propriétés du gaz à l'équilibre	29
5.1	Vitesse thermique	29
5.2	Tenseur des contraintes	30
5.3	Flux de chaleur	31
6	Flux à la paroi	33
6.1	Flux de masse	33
6.2	Flux d'impulsion	35
6.3	Flux de chaleur	36
7	Interaction gaz-paroi solide	39
7.1	Réflexion spéculaire	39
7.2	Réflexion diffuse	40
7.3	Réflexion avec accommodation partielle	41
8	Calculs en régime moléculaire libre	43
8.1	Calcul des flux de masse incident et réfléchi	44
8.2	Calcul de la pression	46

9	Modèles de collisions entre molécules pour le régime raréfié	49
9.1	Équation de Boltzmann	49
9.2	Propriétés de l'opérateur de collision	50
9.3	Lien cinétique/macrosopique : les lois de conservation	51
9.4	Théorème H et convergence vers l'équilibre	52
9.5	Modèle BGK	54
10	Analyse asymptotique	57
10.1	Analyse dimensionnelle	57
10.2	De Boltzmann à Euler	59
10.3	De Boltzmann à Navier-Stokes	61
11	Simulation numérique d'un écoulement raréfié	67
11.1	Généralités	67
11.2	Une méthode différences finies en 1D	68
11.2.1	Le modèle	68
11.2.2	Discrétisation en vitesse	69
11.2.3	Discrétisation en espace et en temps	72
11.2.4	Prise en compte des conditions aux limites	72
11.2.5	Positivité du schéma	73
12	Exercices	75
13	TP : onde de choc dans un gaz	77
13.1	Régime moléculaire libre	77
13.2	Régime raréfié : équation BGK	78
13.3	Régime dense	79
A	Compléments	81
A.1	Notations : opérateurs différentiels et vectoriels	81
A.2	Intégrales gaussiennes	82
A.2.1	Intégrales de gaussienne unidimensionnelle	82
A.2.2	Moments de la maxwellienne absolue M_0 en dimension quelconque	83
A.2.3	Calcul de $\langle V \otimes V (B(V) : \nabla_x u) M_0(V) \rangle$	86
A.2.4	Calcul de $\langle \frac{1}{2} V V ^2 (A(V) \cdot \nabla_x T) M_0(V) \rangle$	86
A.3	Dérivées de la maxwellienne	87
A.4	L'opérateur de collision de Boltzmann	87
A.4.1	Propriétés de conservation de $Q(f)$	88
A.4.2	Théorème H et convergence vers l'équilibre	92
	Bibliographie	97
	Crédits	99

Chapitre 1

Descriptions microscopique / macroscopique d'un gaz

Dans cette section, nous expliquons comment on peut décrire un gaz à deux échelles très différentes : l'une microscopique, dite échelle moléculaire, et l'autre macroscopique, dite échelle fluide. Ce gaz est constitué d'une seule espèce de molécules (de même masse m), elles-mêmes constituées d'un seul atome. De tels gaz sont par exemple l'hydrogène ou l'argon, fréquemment utilisés dans les expériences de dynamique des gaz. Un gaz comme de l'air n'entre pas dans cette catégorie, puisqu'il est constitué, pour l'essentiel, de deux espèces différentes (l'oxygène et l'azote), chaque espèce étant constituée de molécules à deux atomes.

Selon que le domaine que l'on considère contient un nombre plus ou moins grand de molécules, telle ou telle description sera plus adaptée.

1.1 Description moléculaire d'un gaz monoatomique

Considérons N molécules : au cours du temps t , une molécule (de numéro i) peut être décrite par sa position $x_i(t)$ et sa vitesse $v_i(t)$. La variation en temps de ces deux variables suit la loi de la dynamique de Newton :

$$\begin{aligned}x'_i(t) &= v_i(t), \\mv'_i(t) &= F_i(t),\end{aligned}$$

où $F_i(t)$ représente la somme des forces s'exerçant sur la molécule. Cette force peut se décomposer en la somme des forces exercées à distance par chaque molécule $j \neq i$, que l'on peut décrire à l'aide d'un potentiel intermoléculaire, et l'on a ainsi $F_i(t) = \sum_{j \neq i} \nabla U(x_i(t) - x_j(t))$. Le but de ce cours n'étant pas de donner une description précise de ce modèle, nous ne dirons rien de plus sur cette force. Il convient juste de remarquer que ce terme couple toutes les molécules entre elles, et donc que l'ensemble de N molécules est décrit par un système de $2N$ équations différentielles non linéaires.

Un tel système peut donc a priori être résolu à l'aide de méthodes classiques déjà vues en L3 (méthodes de Runge-Kutta, méthodes multi-pas, etc.). On parle alors de méthode de *dynamique moléculaire*. La difficulté essentielle de ce système est qu'en général, N est très

grand. À titre d'exemple, le nombre de molécules dans un cm^3 à pression et température ambiante est $2.7 \cdot 10^{19}$.

Même avec les ordinateurs actuels, la simulation d'un tel système n'est faisable que pour des ensembles d'au plus 10^8 molécules, sur des temps d'au plus 100 ns^1 . C'est pourquoi la dynamique moléculaire n'est utilisée que pour étudier des systèmes très particuliers : interaction d'un gaz avec une paroi solide par exemple.

1.2 Description macroscopique

Si le nombre de molécules contenu dans le domaine considéré est extrêmement grand, il est pertinent de considérer le gaz comme un milieu continu, appelé aussi "fluide". On peut donc le décrire au moyen de quantités moyennes, en particulier les suivantes :

la masse volumique $\rho(t, x)$ ou densité volumique de masse : c'est la masse de gaz par unité de volume (par un abus de langage extrêmement fréquent, cette quantité est souvent appelée simplement "densité"). Ainsi, la masse de gaz dans un petit volume dx autour de la position x au temps t est $\rho(t, x)dx$. Par conséquent, la masse d'un volume $\Omega \in \mathbb{R}^3$ de gaz sera définie par $M = \int_{\Omega} \rho(t, x) dx$. L'unité standard de ρ est kg.m^{-3} .

la vitesse $u(t, x)$ vecteur de \mathbb{R}^3 , représente la vitesse du fluide au point x à l'instant t . La quantité $\rho(t, x)u(t, x)$ est donc la quantité de mouvement (ou impulsion) par unité de volume. Par un autre abus de langage, on l'appelle souvent simplement la "quantité de mouvement". L'unité standard de u est m.s^{-1} .

la température $T(t, x)$ qui rend compte de l'agitation des molécules de gaz. Son unité standard est K ($273 \text{ K} \approx 1^\circ\text{C}$).

D'autres quantités peuvent être définies, comme :

la pression $p(t, x)$: elle représente la force normale exercée par les molécules de gaz sur une surface plane. Pour un gaz parfait (comme ceux considérés dans ce cours), cette quantité peut être reliée à la masse volumique et à la température par la loi d'état $p = \rho RT$, où R est la constante du gaz considéré. Cette constante est définie par le rapport $R = k/m$, où m est la masse d'un molécule de gaz et k est la constante universelle de Boltzmann ($k \approx 1.381 \cdot 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$). Pour l'argon, on a $m = 0.663 \cdot 10^{-25} \text{ kg}$ et donc $R \approx 208 \text{ J.kg}^{-1}.\text{K}^{-1}$. L'unité de p est N.m^{-2} , appelée pascal (P).

la densité volumique d'énergie totale $E(t, x)$ (souvent appelée "énergie totale" tout court) définie par $E = \frac{1}{2}\rho|u|^2 + \frac{3}{2}\rho RT$. Elle se décompose en une densité d'énergie cinétique moyenne $\frac{1}{2}\rho|u|^2$ et une densité d'énergie interne $\frac{3}{2}\rho RT$. L'unité de ces densités d'énergie est J.m^{-3} .

1. Remarquer qu'une méthode comme le schéma d'Euler explicite appliqué à ce système nécessiterait à chaque pas de temps le calcul de N forces F_i , chacune nécessitant le calcul de N termes. On aurait ainsi un coût en $O(N^2)$, ce qui est bien trop coûteux pour atteindre la simulation de 10^8 molécules. Une méthode numérique révolutionnaire, la méthode "multipôles" née dans les années 1990, permet de réduire ce coût à $O(N)$, et donc de faire des calculs tels que celui indiqué.

Différents modèles existent en mécanique pour décrire l'évolution de ces quantités. Un modèle courant en aérodynamique est constitué des équations d'Euler pour un gaz compressible (dites "Euler compressible") :

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla \cdot \rho u &= 0, \\ \partial_t \rho u + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla p &= 0, \\ \partial_t E + \nabla \cdot (E + p)u &= 0.\end{aligned}\tag{1.1}$$

Ce système est constitué de trois lois de conservation : de la masse, de la quantité de mouvement, et de l'énergie. Il s'agit d'un système non linéaire qui décrit bien la propagation des ondes de choc dans un gaz. Par contre, il ne tient pas compte des effets dissipatifs (diffusion de la quantité de mouvement et de la chaleur).

Quand on veut décrire ces effets dissipatifs pour un gaz compressible, il faut alors utiliser les équations de Navier-Stokes (dites "Navier-Stokes compressible") :

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla \cdot \rho u &= 0, \\ \partial_t \rho u + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla p &= -\nabla \cdot \sigma, \\ \partial_t E + \nabla \cdot (E + p)u &= -\nabla \cdot q - \nabla \cdot (\sigma u),\end{aligned}\tag{1.2}$$

où σ et q sont le tenseur des contraintes de cisaillement et le flux de chaleur, définis par

$$\sigma = -\mu(\nabla u + (\nabla u)^T - \frac{2}{3}\nabla \cdot u I) \quad \text{et} \quad q = -\kappa \nabla \cdot T,\tag{1.3}$$

et où μ et κ sont les coefficients de viscosité et de transfert thermique, dépendants de T . La première relation, qui établit une relation linéaire entre σ et u , est appelée loi de Newton. La deuxième, qui établit une relation linéaire entre le flux de chaleur et le gradient de température, est la loi de Fourier.

Les équations de Navier-Stokes compressible constituent le modèle le plus complet de la mécanique des milieux continus pour décrire le gaz. Il existe bien d'autres modèles pour décrire des situations plus particulières : écoulements incompressibles, propagation d'ondes acoustiques dans un gaz au repos, etc., et nous en verrons quelques uns plus tard.

Remarque 1.1. Les notations ∇ , $\nabla \cdot$, $u \otimes u$ sont classiques en mécanique des fluides. Elles sont néanmoins explicitées dans l'appendice A.1.

Chapitre 2

Description cinétique

2.1 Fonction de distribution

À présent, nous nous plaçons dans une situation intermédiaire : il y a beaucoup de molécules, mais pas trop. Cette situation un peu floue sera éclaircie dans la section suivante.

Dans ce cas, nous allons encore utiliser une masse volumique, mais avec une notion de volume un peu modifiée.

On considère donc la *fonction de distribution* $f(t, x, v)$ qui est la densité de masse de gaz par unité de volume dans l'espace position-vitesse (appelé espace des phases). Autrement dit, la masse des molécules de gaz présentes au temps t dans un petit volume dx autour du point x dont le vecteur vitesse est dans un petit élément dv autour de v est $f(t, x, v)dx dv$. Contrairement à la densité ρ définie précédemment, la densité f ne prend en compte que les molécules ayant une certaine vitesse.

On peut aussi considérer la densité numérique \tilde{f} de molécules de gaz, c'est-à-dire le nombre de molécules par unité de volume dans l'espace des phases. Avec un gaz monoatomique, toutes les molécules ayant la même masse m , cette densité est $\tilde{f} = f/m$, de sorte que le nombre de molécules de gaz présent dans un petit volume dx dont le vecteur vitesse est dans un petit élément dv autour de v soit $\tilde{f}(t, x, v)dx dv = (\frac{1}{m})f(t, x, v) dx dv$.

Pour éviter toute ambiguïté, nous noterons parfois différemment les espaces des variables position vitesse : ainsi, nous noterons \mathbb{R}_x^3 pour l'espace des positions x , et de même \mathbb{R}_v^3 pour l'espace des positions v .

2.2 Quantités macroscopiques

Il est possible de faire le lien entre la densité f et les densités précédentes. Pour la densité de masse ρ , qui est la masse de gaz par unité de volume, procédons comme suit. Notons que par définition de f , la masse des molécules de gaz dans le volume dx autour de x dont la vitesse est dans dv autour de v est $f(t, x, v) dx dv$. La masse de gaz dM dans le volume dx (c'est-à-dire la masse de toutes les molécules, quelle que soit leur vitesse) s'obtient naturellement en sommant sur toutes les vitesses possibles pour trouver $dM = (\int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) dv) dx$. La densité de masse $\rho(t, x)$ s'obtient donc en divisant dM par dx et l'on

trouve

$$\rho(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) dv. \quad (2.1)$$

Pour la quantité de mouvement, procédons maintenant plus rapidement : notons que la quantité de mouvement par unité de volume des molécules en x ayant une vitesse dans dv autour de v est $v \times \{ \text{la masse de ces molécules} \} = v f(t, x, v) dv$. Ainsi, la quantité de mouvement des molécules par unité de volume en x est :

$$\rho(t, x)u(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} v f(t, x, v) dv, \quad (2.2)$$

d'où la vitesse moyenne, ou macroscopique, du gaz au point x :

$$u(t, x) = \frac{1}{\rho(t, x)} \int_{\mathbb{R}^3} v f(t, x, v) dv. \quad (2.3)$$

Enfin, l'énergie par unité de volume des molécules en x ayant une vitesse dans dv autour de v n'est autre que l'énergie cinétique d'une molécule multipliée par le nombre de ces molécules, soit $\frac{1}{2}|v|^2 f(t, x, v) dv$. Ainsi, l'énergie des molécules par unité de volume en x est :

$$E(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2}|v|^2 f(t, x, v) dv. \quad (2.4)$$

On peut aussi s'intéresser à l'énergie d'agitation des molécules : il s'agit de celle liée au mouvement des molécules autour du mouvement moyen du gaz. L'énergie cinétique d'un molécule relativement à ce mouvement moyen est $\frac{1}{2}m|v - u|^2$, et l'énergie d'agitation par unité de volume est donc

$$E_{th}(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2}|v - u|^2 f(t, x, v) dv. \quad (2.5)$$

Un simple développement du terme $|v - u|^2$ montre la relation entre les deux densités : $E = \frac{1}{2}\rho|u|^2 + E_{th}$. Autrement dit, la densité d'énergie totale se décompose en une densité d'énergie cinétique moyenne, due au mouvement moyen du gaz, plus une densité d'énergie interne, due au mouvement relatif des molécules les unes par rapport aux autres. Cette dernière est appelée densité d'énergie thermique. Des arguments de thermodynamique et de physique statistique permettent de montrer que cette densité d'énergie thermique s'écrit $E_{th} = \frac{3}{2}\rho RT$, où T est la température du gaz. On obtient alors aisément la relation suivante entre la température T et la distribution f :

$$T(t, x) = \frac{1}{\frac{3}{2}\rho(t, x)R} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2}|v - u|^2 f(t, x, v) dv. \quad (2.6)$$

Remarque 2.1. En mathématiques, une intégrale du type $\int_{\mathbb{R}^3} v^k g(v) dv$ est appelée *moment* d'ordre k de la distribution g . Ainsi, les densités de masse, de quantité de mouvement, et d'énergie totale définies dans (2.1)–(2.4) sont respectivement des moments d'ordre 0, 1, et 2 de f .

Exercice 2.1. Démontrer que $E = \frac{1}{2}\rho|u|^2 + E_{th}$.

2.3 Distribution à l'équilibre

Un exemple fondamental d'une fonction de distribution est la distribution maxwellienne que nous présentons maintenant. Considérons un gaz de densité de masse ρ , de vitesse u et de température T données (pour un temps et une position données). Il est facile de concevoir qu'à cet état macroscopique correspondent une multitude d'états microscopiques : au niveau cinétique, cela revient à dire qu'il existe une multitude de fonctions de distributions f satisfaisant les relations (2.1)–(2.4). Maxwell a montré au XIX^e siècle que la distribution la plus probable (volontairement, ce terme n'est pas précisé ici) est une fonction gaussienne centrée sur u et d'écart type \sqrt{RT} . Sa notation et sa définition sont :

$$M[\rho, u, T](v) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp\left(-\frac{|v - u|^2}{2RT}\right). \quad (2.7)$$

Cette fonction de distribution est appelée distribution maxwellienne (voir figure 2.1). Ce n'est rien d'autre qu'une distribution gaussienne (aussi appelée loi normale) centrée sur u et d'écart type \sqrt{RT} .

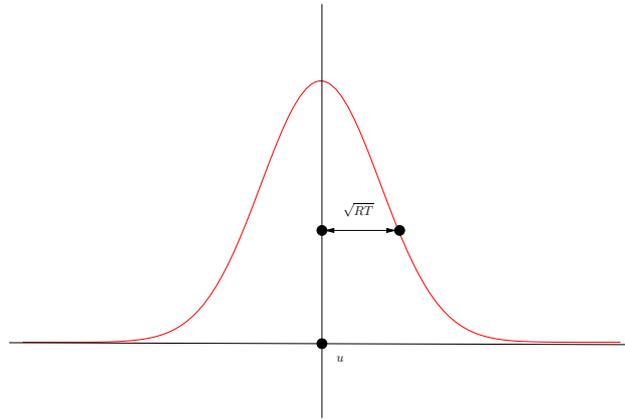


FIGURE 2.1 – Maxwellienne $M[\rho, u, T]$ (vue 1D).

La distribution maxwellienne est essentielle dans bon nombre de problèmes de théorie cinétique des gaz, et permet de faire un certain nombre de calculs analytiques explicites, comme le calcul des coefficients aérodynamiques en régime moléculaire libre, par exemple (voir la section 8).

Exercice 2.2. Démontrer que les moments de la maxwellienne $M[\rho, u, T]$ sont bien ρ , ρu , et $E = \frac{1}{2}\rho|u|^2 + \frac{3}{2}\rho RT$. Aide : voir les formules gaussiennes dans les appendices A.2.1 et A.2.2.

2.4 Quelle description utiliser ?

Nous avons vu dans les sections précédentes que les descriptions microscopique ou macroscopique sont pertinentes quand il y a peu ou beaucoup de molécules, la description cinétique étant intéressante dans une situation intermédiaire : les molécules de gaz ne sont pas considérées individuellement, mais au moyen d'une quantité moyenne, qui est prise sur des

ensembles plus petits que les moyennes macroscopiques. On parle parfois d'une description mesoscopique.

Cependant cette notion de nombre de molécules est une notion absolue qui n'a pas beaucoup de sens, car celle-ci dépend du volume que l'on considère. Il nous faut donc une notion relative, et celle-ci est donnée par le *nombre de Knudsen*.

Considérons que le gaz évolue dans un tube d'une longueur donnée L , ou bien qu'il circule autour d'une navette (de longueur L) en rentrée dans l'atmosphère. Plus généralement, la longueur L est une grandeur caractéristique du volume dans lequel on veut étudier le gaz. Les molécules de gaz se déplacent dans toutes les directions en suivant des trajectoires rectilignes. Ces trajectoires sont modifiées quand les molécules entrent en collision, soit entre elles, soit avec les parois d'un obstacle. Une longueur typique du gaz à l'échelle microscopique est le *libre parcours moyen*, ou distance moyenne parcourue par une molécule avant de subir une collision. Cette longueur est souvent notée λ et dépend de la densité de masse du gaz et de sa température. Par opposition, la longueur L est dite macroscopique, car représentative du gaz à l'échelle d'un objet bien plus grand qu'une molécule (taille du tube ou de la navette pour nos exemples précédents).

Nous pouvons alors préciser dans quels cas on considère qu'il y a peu ou beaucoup de molécules. Si $\lambda \gg L$, les molécules peuvent traverser tout le domaine sans subir une collision : il y a donc très peu de molécules, le gaz est dit très raréfié (on parle aussi de *régime moléculaire libre*), et une description microscopique peut être pertinente. Si $\lambda \ll L$, les molécules subissent un grand nombre de collisions. Il y en a donc beaucoup, le gaz est dit dense, et une description macroscopique est pertinente. Si $\lambda \approx L$, c'est une situation intermédiaire pour laquelle on peut utiliser la description cinétique : le gaz est dit raréfié, ou peu dense.

Ces trois situations peuvent être résumées avec le nombre de Knudsen Kn défini par

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L}. \quad (2.8)$$

Le gaz est très raréfié si $\text{Kn} \gg 1$, raréfié si $\text{Kn} \approx 1$, en régime transitionnel si $\text{Kn} < 1$ et dense (ou en régime fluide) si $\text{Kn} \ll 1$.

On rencontre ces situations dans deux configurations assez différentes. Dans la première, la longueur L est constante, et le libre parcours moyen est plus ou moins grand. C'est typiquement le cas en aérodynamique, lors de la rentrée d'un véhicule spatial (navette ou capsule) dans l'atmosphère. Celui-ci vole dans l'espace, où il n'y a pas de gaz, puis il rencontre les plus hautes couches de l'atmosphère, où la densité d'air est très faible (au delà de 100 km), puis des couches intermédiaires autour de 100 km, puis les basses couches en dessous de 60 km, dans lesquelles la densité de l'air est plus grande. Le nombre de Knudsen passe donc d'une valeur très grande à une valeur très petite.

Inversement, c'est le libre parcours moyen qui peut être donné, comme dans le cas de l'air à pression ambiante (où $\lambda \approx 1 \text{ nm}$) : considérons alors une machine dans laquelle circule cet air (une pompe par exemple). Si cette machine est d'une taille de l'ordre du mètre, alors le nombre de Knudsen est très petit ($\approx 10^{-9}$). Par contre, si c'est une machine microscopique, disons d'une taille de $0.01 \mu\text{m}$, alors le nombre de Knudsen est plus grand, de l'ordre de 0.1, et l'écoulement est régime transitionnel. Ce dernier exemple apparaît dans les problèmes liés aux systèmes micro-électro-mécaniques (MEMS en anglais), qui sont des minuscules machines

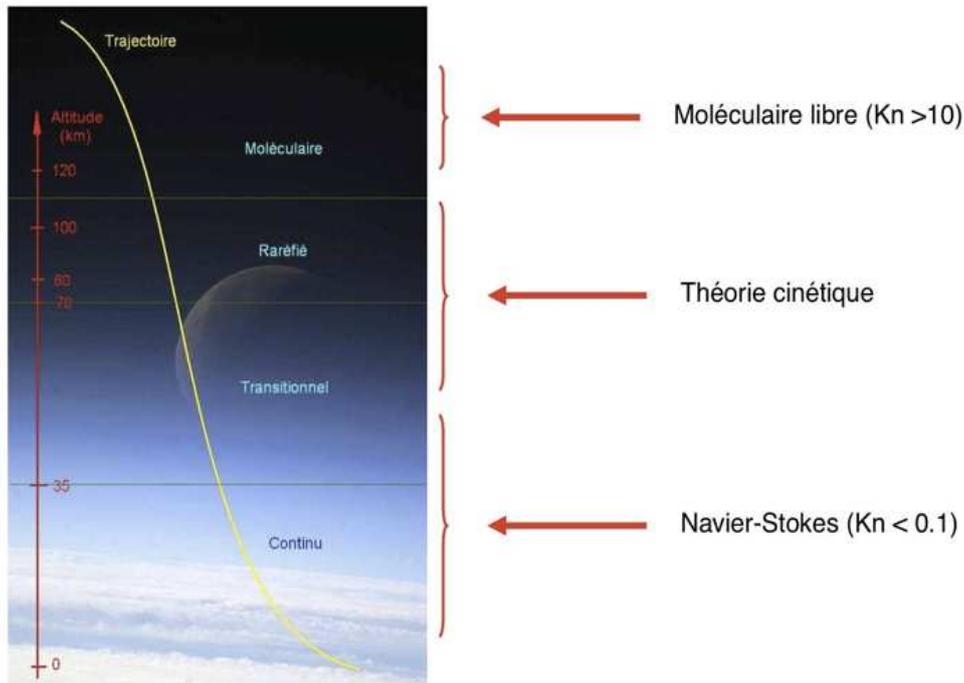


FIGURE 2.2 – Trajectoire typique lors d’une rentrée atmosphérique, régimes d’écoulements en fonction de l’altitude, et modèles correspondants.

équipant de nombreux appareils électroniques (micro-actionneurs, micro-gyroscopes, micro-senseurs, etc.), voir figure 2.3.

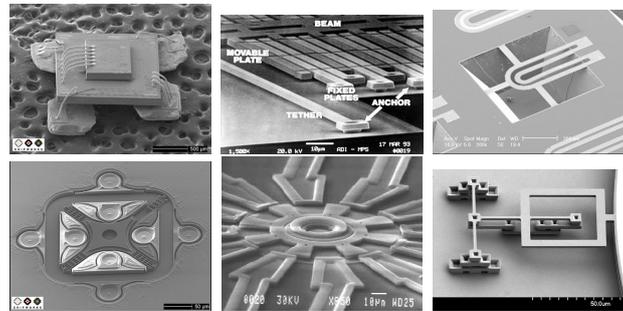


FIGURE 2.3 – Quelques MEMS : Gyromètre, accéléromètre, inducteur, gyroscope, rotor, charnière (de gauche à droite et de haut en bas)

Citons enfin le problème des pompes à vide : ces machines pompent du gaz afin d’obtenir un vide plus ou moins poussé (en fait un gaz plus ou moins raréfié), et les gaz circulent dans ces machines sous un régime raréfié pour lequel une description cinétique est nécessaire, voir figure 2.4.

Il reste à présent à voir comment la théorie cinétique et la description du gaz par la fonction de distribution permet de calculer des quantités d’intérêt (pression, contraintes, flux de chaleur, etc.), et de prédire l’évolution d’un écoulement.

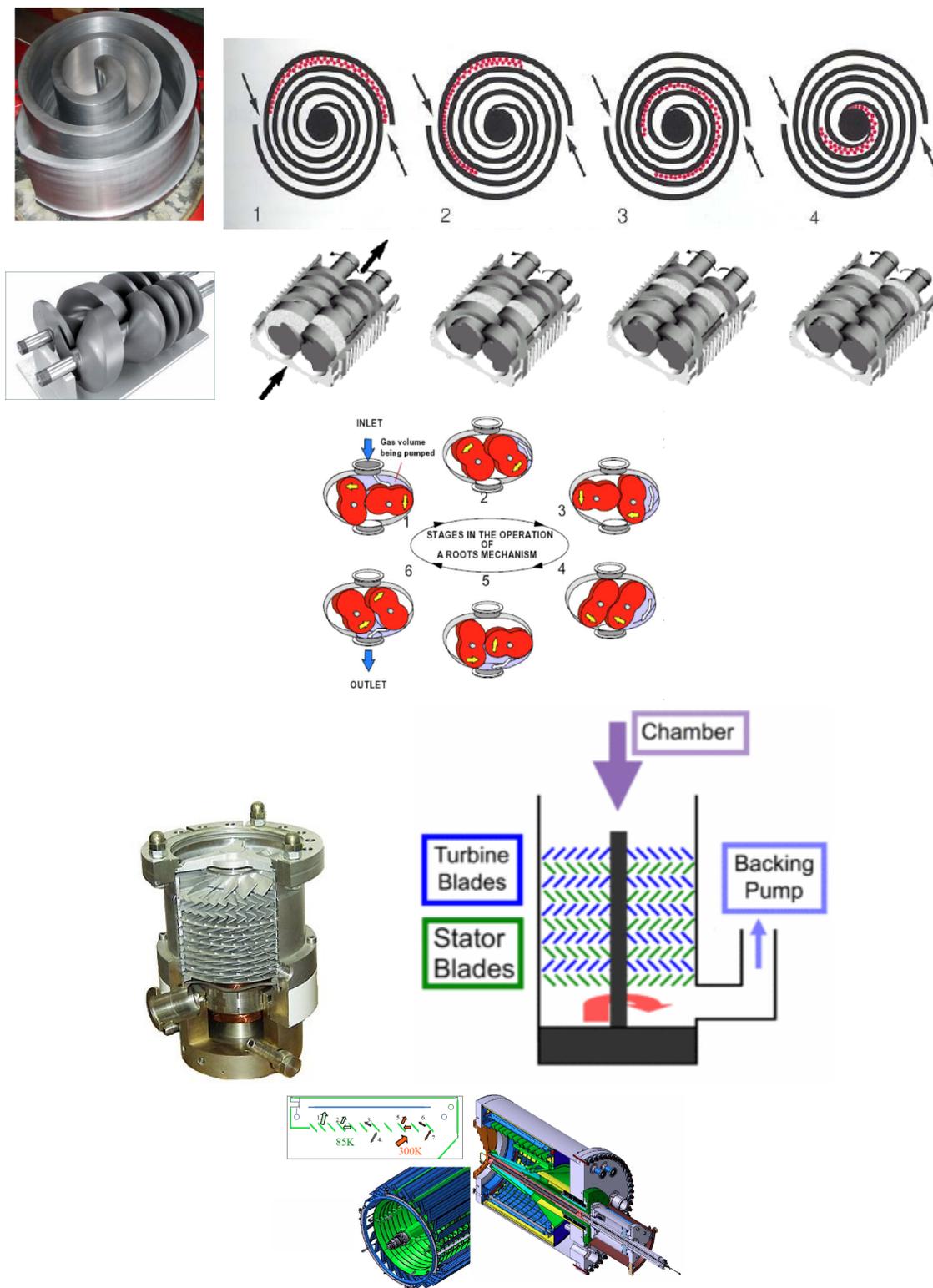


FIGURE 2.4 – Quelques pompes à vide : à spirale, à vis, à lobes, turbomoléculaire, cryopompe.

Chapitre 3

Calcul cinétique de la pression

Nous montrons ici comment des arguments élémentaires permettent de calculer la pression exercée par un gaz sur une paroi, pour ainsi retrouver la loi des gaz parfaits.

Supposons un gaz monoatomique enfermé dans une enceinte cubique, de faces perpendiculaires aux axes e_1 , e_2 , et e_3 . Le gaz et l'enceinte sont en équilibre, tous deux à la température constante T . La vitesse macroscopique du gaz est nulle, et sa densité est une donnée ρ , homogène dans l'enceinte, et constante au cours du temps. Cela revient à supposer que la fonction de distribution du gaz est la maxwellienne $f = M[\rho, 0, T]$. Notez que même si le gaz n'a pas de mouvement moyen, les molécules sont bien agitées d'un mouvement incessant (leurs vitesses sont distribuées selon la loi normale associée à la maxwellienne). À cause de cette agitation, certaines molécules vont heurter les parois de l'enceinte, et le gaz va ainsi exercer une pression sur les parois.

On souhaite maintenant calculer cette pression. Pour cela, rappelons que cette pression n'est autre que la contrainte normale exercée par le gaz sur la paroi. Autrement dit, considérons un élément de surface dS de la paroi, de normale unitaire n dirigée vers l'intérieur de l'enceinte (voir figure 3.1); le gaz exerçant une force $F_{\text{gaz} \rightarrow dS}$ sur dS , la pression et cette force sont reliées par la relation

$$F_{\text{gaz} \rightarrow dS} = -pndS. \quad (3.1)$$

Le signe $-$ est rendu nécessaire par la convention que la pression doit être une quantité positive : ainsi, la force exercée par le gaz est bien opposée à n (le gaz « pousse » la paroi).

Calculer la pression, c'est donc calculer la force $F_{\text{gaz} \rightarrow dS}$. Pour cela, rappelons que d'après la loi de Newton, cette force est induite par un changement d'impulsion de dS pendant un court instant dt , qui ne peut être dû qu'à l'impact de collisions moléculaires sur la paroi. La description cinétique va permettre de calculer le nombre de ces impacts, et ainsi d'en déduire la variation de la quantité de mouvement transmise, et par suite, la force et la pression.

Les molécules de vitesse v qui vont impacter la surface dS pendant dt sont celles contenues dans le cylindre \mathcal{C} de base dS , de génératrice $-v$, et de hauteur $(-v \cdot n)dt$. Le volume de ce cylindre est donc $dx = (-v \cdot n)dtdS$.

Nous souhaitons maintenant savoir combien il y a de telles molécules dans le cylindre. Cela est possible en utilisant la fonction de distribution \tilde{f} , mais nous devons alors légèrement élargir la famille de ces molécules, et considérer toutes celles dont la vitesse est dans l'élément dv autour de v . Par définition de la densité numérique de molécules \tilde{f} , il y a donc $\tilde{f}dx dv$

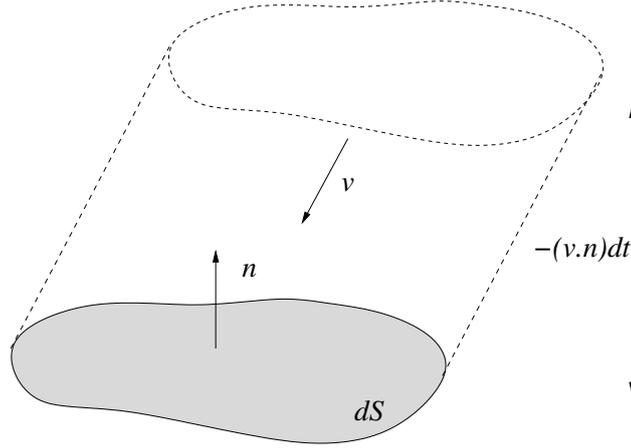


FIGURE 3.1 – Cylindre contenant les particules de vitesse v qui impactent dS pendant dt .

molécules de ce type dans le cylindre¹. Chacune de ces molécules porte une quantité de mouvement mv . La quantité de mouvement cumulée des molécules considérées est donc $d\mathcal{I}_{inc} = mv\tilde{f}dvdx = v(-v \cdot n)f dv dt dS$. La somme des impulsions de toutes les molécules incidentes s'obtient en intégrant $d\mathcal{I}_{inc}$ sur toutes les vitesses incidentes possibles, et l'on trouve donc l'impulsion incidente totale des molécules impactant dS pendant dt

$$\mathcal{I}_{inc} = \left(\int_{v \cdot n < 0} v(-v \cdot n)f dv \right) dt dS. \quad (3.2)$$

Après avoir heurté la paroi, les molécules incidentes sont maintenant réfléchies, avec une nouvelle impulsion. La modélisation de ces réflexions fera l'objet de la section 7, mais pour le moment, notre hypothèse d'équilibre suffit : la distribution des molécules réfléchies est la même que la distribution des molécules incidentes. Avec le même raisonnement que ci-dessus, on peut donc aisément calculer l'impulsion des particules réfléchies (qui ont maintenant des vitesses v telles que $v \cdot n > 0$). On choisit une vitesse quelconque v , orientée dans le même sens que n , on considère le cylindre généré par v et de hauteur $(v \cdot n)dt$ qui contient toutes les molécules de vitesse v réfléchies par dS pendant dt , on calcule l'impulsion de ces molécules, et en intégrant sur v , on trouve que l'impulsion de toutes les particules réfléchies est

$$\mathcal{I}_{ref} = \left(\int_{v \cdot n > 0} v(v \cdot n)f(t, x, v) dv \right) dt dS. \quad (3.3)$$

Relions maintenant ces deux impulsions à une force. Le système de particules considérés voit son impulsion passer de \mathcal{I}_{inc} à \mathcal{I}_{ref} durant l'intervalle de temps dt . La loi de la dynamique de Newton relie cette variation à une force exercée par dS sur les molécules selon la formule

$$F_{dS \rightarrow gaz} = \frac{\mathcal{I}_{ref} - \mathcal{I}_{inc}}{dt}.$$

1. En fait, pour chaque vitesse v' dans dv , le cylindre associé est légèrement différent, et de volume $dx' = -(v + dv) \cdot n) dt dS = dx + O(dv dt dS)$. Cette différence peut être négligée. On peut toutefois éviter ce raisonnement qui utilise la notion délicate de grandeurs infinitésimales en calculant directement la quantité de mouvement des molécules qui vont impacter toute la surface pendant un court instant. Le calcul correspondant est mathématiquement rigoureux, mais beaucoup plus long, et donne évidemment le même résultat que celui obtenu ci-dessus. Nous continuerons donc dans la suite à utiliser ce calcul infinitésimal.

Les relations (3.2) et (3.3) donnent donc

$$F_{dS \rightarrow \text{gaz}} = \left(\int_{\mathbb{R}^3} v(v \cdot n) f \, dv \right) dS.$$

Le principe de l'action et de la réaction implique alors que le gaz exerce sur dS une force opposée $F_{\text{gaz} \rightarrow dS}$, et l'on trouve

$$F_{\text{gaz} \rightarrow dS} = - \left(\int_{\mathbb{R}^3} v(v \cdot n) f \, dv \right) dS.$$

Il nous reste à présent à rappeler que $f = M[\rho, 0, T]$ pour calculer l'intégrale ci-dessus. Nous verrons d'autres méthodes par la suite, mais pour le moment, le plus simple est de considérer la face perpendiculaire à la direction e_1 , de sorte que $n = -e_1$ et donc $F_{\text{gaz} \rightarrow dS} = \left(\int_{\mathbb{R}^3} v_1 v M[\rho, 0, T] \, dv \right) dS$. La distribution maxwellienne étant paire par rapport à v , les termes $v_1 v_2 M$ et $v_1 v_3 M$ sont impairs, et donc d'intégrale nulle. Par conséquent, seule la première composante de la force est non nulle et l'on a

$$F_{\text{gaz} \rightarrow dS,1} = \left(\int_{\mathbb{R}^3} v_1^2 M[\rho, 0, T] \, dv \right) dS.$$

On utilise ensuite un changement de variable et des intégrales gaussiennes (voir les appendices A.2.1 et A.2.2) pour trouver $F_{\text{gaz} \rightarrow dS,1} = \rho RT dS$. Ainsi, la force est

$$F_{\text{gaz} \rightarrow dS} = -\rho RT n dS.$$

En comparant avec (3.1), on obtient donc la pression exercée à la paroi qui vaut $p = \rho RT$. On a donc ainsi retrouvé la loi des gaz parfaits. On obtient évidemment le même résultat pour les autres faces de l'enceinte.

Remarque 3.1. Dans le cas d'un gaz hors équilibre, ce raisonnement n'est plus valable tel quel. La force exercée par un gaz en mouvement n'est pas normale à la paroi, et le gaz exerce donc aussi des contraintes tangencielles (voir la section 7). Cependant, on peut définir une pression interne au gaz, et par un calcul du même type, on peut montrer que la loi des gaz parfaits est tout de même satisfaite (voir la section 4).

Chapitre 4

Flux

Dans cette section, nous définissons la notion de flux à travers une surface : flux de masse, flux de quantité de mouvement, et flux d'énergie. Cela nous permettra de retrouver la notion de tenseur des contraintes et de flux de chaleur de la mécanique des fluides, et aussi de retrouver la loi des gaz parfaits dans un cas général.

4.1 Flux de masse

On considère une surface élémentaire dS au sein du gaz, de normale n . Cette surface est virtuelle, au sens où elle n'est pas une surface solide. Le but est de calculer la quantité de gaz qui traverse cette surface par unité de temps. Si l'on mesure la quantité de gaz par sa masse, on va donc obtenir une masse (en kg) par seconde. Notons que le gaz peut traverser S d'un côté ou de l'autre (voir figure 4.1). Nous allons donc considérer le bilan de masse *net*, de sorte que ce bilan sera nul si la quantité de matière qui traverse S est la même des deux côtés.

Pour ce calcul, nous reprenons le même raisonnement que celui utilisé section 3. Considérons une vitesse v dirigée vers la surface, du côté vers lequel pointe n (à droite sur la figure 4.1). Les molécules de vitesse dans dv autour de v qui vont traverser dS pendant dt sont celles contenues dans le cylindre dont le volume est $dx = -(v \cdot n) dt dS$. Par définition de la fonction de distribution, la masse des molécules de gaz de vitesse dans dv autour de v contenues dans ce cylindre est $f dx dv$ (voir section 2.1). Ainsi, notons $d\mathcal{M}_D$ cette masse, qui vaut

$$d\mathcal{M}_D = -(v \cdot n) f dt dS dv.$$

La masse totale de gaz s'obtient en intégrant sur toutes les vitesses possibles, soit

$$\mathcal{M}_D = \left(\int_{v \cdot n < 0} -(v \cdot n) f dv \right) dS dt.$$

On peut ensuite faire le même raisonnement pour les molécules qui traversent dS par le côté gauche, et l'on trouve la masse

$$\mathcal{M}_G = \left(\int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) f dv \right) dS dt.$$

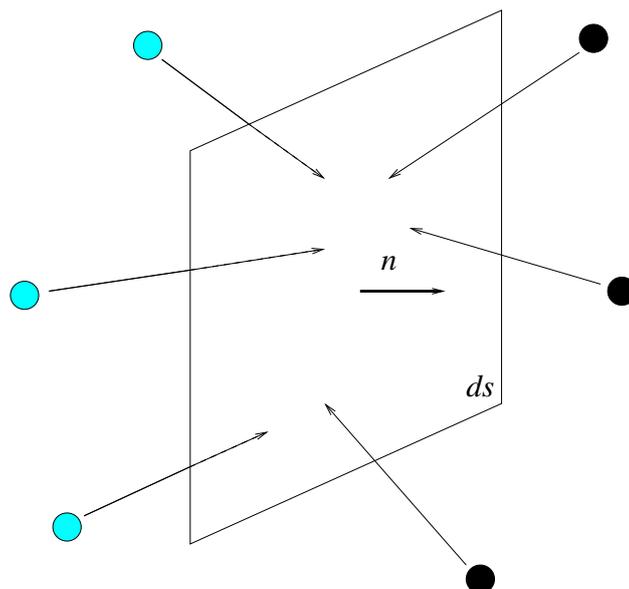


FIGURE 4.1 – Flux de masse à travers une surface virtuelle

Le bilan net de masse qui a traversé dS pendant dt est donc

$$\mathcal{M}_G - \mathcal{M}_D = \left(\int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) f \, dv \right) dS dt - \left(\int_{v \cdot n < 0} -(v \cdot n) f \, dv \right) dS dt = \left(\int_{\mathbb{R}^3} (v \cdot n) f \, dv \right) dS dt.$$

Si l'on divise ce bilan par dt , on a la quantité de masse qui traverse dS par seconde. Pour définir une quantité indépendante de la surface choisie, on peut aussi vouloir calculer la masse de gaz qui traverse dS par seconde *par unité d'aire*, soit une masse par seconde par mètre carré. Il suffit alors de diviser le bilan ci-dessus par $dS dt$ pour trouver

$$\begin{aligned} \Phi_m &= \frac{\mathcal{M}_G - \mathcal{M}_D}{dS dt} = \int_{\mathbb{R}^3} (v \cdot n) f \, dv \\ &= \left(\int_{\mathbb{R}^3} v f \, dv \right) \cdot n. \end{aligned}$$

Cette quantité est appelée *flux de masse*, le terme « flux » indiquant que la quantité est mesurée par unité de surface et de temps, et d'unité $\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$. En utilisant la définition de la vitesse moyenne (2.2), on trouve aussi l'expression

$$\Phi_m = \rho u \cdot n. \quad (4.1)$$

La densité de quantité de mouvement ρu peut donc s'interpréter comme un vecteur flux de masse, qui permet de calculer le flux de masse à travers toute surface.

Remarque 4.1. Notons que le choix arbitraire de calculer le bilan net par la différence $\mathcal{M}_G - \mathcal{M}_D$, et non pas par l'expression opposée, est celui qui donne un flux positif quand la vitesse moyenne est dirigé du même côté que n (voir l'expression 4.1). C'est un donc un choix assez naturel.

4.2 Flux d'impulsion, tenseur des contraintes

Comme nous l'avons vu dans la section 3, les molécules peuvent exercer une force même quand le gaz est macroscopiquement au repos. Le calcul des contraintes s'exerçant sur une surface virtuelle dans le gaz doit donc se faire indépendamment de son mouvement moyen. Nous supposons ainsi que la surface élémentaire dS se déplace maintenant à la vitesse macroscopique u : autrement dit, nous suivons le gaz dans son mouvement moyen, et nous allons calculer le flux de quantité de mouvement relatif à travers cette surface.

Le raisonnement est alors très proche de celui détaillé pour le calcul de la pression (section 3) et du flux de masse (section 4.1). On commence par calculer l'impulsion des molécules qui vont impacter la surface pendant dt en venant de la droite : ces molécules sont celles dont la vitesse relative par rapport à la surface, soit $v - u$, est telle que $(v - u) \cdot n < 0$. Ces molécules sont contenues dans le cylindre de base dS , de génératrice $v - u$, et de hauteur $-(v - u) \cdot n$. L'impulsion relative d'une particule est $m(v - u)$, et le volume du cylindre est $dx = -(v - u) \cdot n dt dS$. L'impulsion (relative) de toutes les particules du cylindre de vitesse dans dv autour de $v - u$ est donc $(v - u)f(t, x, v)(-(v - u) \cdot n) dv dt dS$. On obtient l'impulsion totale des particules venant de la droite, quelle que soit leur vitesse, en intégrant par rapport à v pour trouver

$$\mathcal{I}_D = \left(\int_{(v-u) \cdot n < 0} (v - u)(-(v - u) \cdot n) f(t, x, v) dv \right) dt dS.$$

Pour les particules venant de la gauche, le raisonnement est le même, en inversant le signe de $(v - u) \cdot n$, et l'on trouve

$$\mathcal{I}_G = \left(\int_{(v-u) \cdot n > 0} (v - u)((v - u) \cdot n) f(t, x, v) dv \right) dt dS.$$

Le bilan net d'impulsion est donc

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_G - \mathcal{I}_D &= \left(\int_{\mathbb{R}^3} (v - u)((v - u) \cdot n) f(t, x, v) dv \right) dt dS \\ &= \left(\int_{\mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) f(t, x, v) dv \right) n dt dS. \end{aligned}$$

Par un argument déjà donné section 3, ce bilan d'impulsion, divisé par dt , s'interprète comme une force exercée par la surface sur le gaz (car on calcule la variation d'impulsion des molécules de gaz, et non la variation d'impulsion de la surface). La force exercée par le gaz sur la surface en est l'opposée, et l'on trouve

$$F_{\text{gaz} \rightarrow dS} = -\frac{\mathcal{I}_D - \mathcal{I}_G}{dt} = -\left(\int_{\mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) f(t, x, v) dv \right) n dS.$$

Comme en mécanique des milieux continus, cette force s'écrit sous la forme

$$F_{\text{gaz} \rightarrow dS} = -\Sigma(f) n dS,$$

où le tenseur $\Sigma(f)$ s'interprète comme un tenseur de contraintes (normales et tangencielles), et s'écrit

$$\Sigma(f) = \int_{\mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) f(t, x, v) dv. \quad (4.2)$$

En mécanique des milieux continus, la pression dans le gaz (parfois appelée pression hydrostatique) est la moyenne des contraintes normales, c'est-à-dire $p = (\Sigma_{11} + \Sigma_{22} + \Sigma_{33})/3 = \frac{1}{3}\text{Trace}(\Sigma)$, et l'on trouve

$$p = \frac{1}{3} \int_{\mathbb{R}^3} |v - u|^2 f(t, x, v) dv.$$

En utilisant la définition de la température (2.6), on établit ainsi la loi des gaz parfaits $p = \rho RT$ dans un cas encore plus général que dans la section précédente, puisque le gaz n'est pas supposé ici être à l'équilibre.

Remarque 4.2. Le choix d'avoir défini $\Sigma(f)$ de façon à avoir $F_{\text{gaz} \rightarrow dS} = -\Sigma n dS$ (avec un signe $-$ au lieu d'un signe $+$) est lié à la décision arbitraire d'avoir calculé un bilan d'impulsion $\mathcal{I}_G - \mathcal{I}_D$ et non pas $\mathcal{I}_D - \mathcal{I}_G$: l'expression finale de Σ ne doit pas dépendre de ce choix (ni de l'orientation de n). Le signe choisi finalement est celui qui donne des contraintes normales positives, pour être cohérent avec la notion usuelle.

4.3 Flux de chaleur

Avec le même raisonnement, il est facile de calculer le flux d'énergie à travers la même surface considérée dans la section précédente. En effet, les molécules de vitesse v venant de la droite portent une énergie cinétique relative $\frac{1}{2}m|v - u|^2$, et l'énergie portée par toutes les particules de vitesse relative dans dv autour de $v - u$ contenues dans le cylindre de volume dx est donc $\frac{1}{2}|v - u|^2 f(t, x, v)(-(v - u) \cdot n) dt dS$. On obtient l'énergie totale des particules venant de la droite, quelle que soit leur vitesse, en intégrant par rapport à v pour trouver

$$\mathcal{E}_D = \left(\int_{(v-u) \cdot n < 0} \frac{1}{2} |v - u|^2 (-(v - u) \cdot n) f(t, x, v) dv \right) dt dS.$$

Pour celles venant de la gauche, on trouve

$$\mathcal{E}_G = \left(\int_{(v-u) \cdot n > 0} \frac{1}{2} |v - u|^2 ((v - u) \cdot n) f(t, x, v) dv \right) dt dS.$$

Le bilan net d'énergie est donc

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_G - \mathcal{E}_D &= \left(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v - u|^2 ((v - u) \cdot n) f(t, x, v) dv \right) dt dS \\ &= \left(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v - u|^2 (v - u) f(t, x, v) dv \right) \cdot n dt dS. \end{aligned}$$

Le flux d'énergie correspondant s'obtient en divisant par dt et dS pour obtenir

$$\Phi_{th} = \frac{\mathcal{E}_G - \mathcal{E}_D}{dt dS} = \left(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v - u|^2 (v - u) f(t, x, v) dv \right) \cdot n. \quad (4.3)$$

Ce flux d'énergie est induit uniquement par le mouvement d'agitation des molécules, et l'énergie correspondante est une énergie thermique (voir la section 2.2). Le flux est donc appelé « flux de chaleur ».

Si les particules ont plus d'énergie à gauche qu'à droite, alors le flux de chaleur (4.3) est positif : il y a un flux de la gauche vers la droite. On définit le *vecteur flux de chaleur* q de façon à ce qu'il "porte" la direction du flux : ici, la normale n étant orientée de la gauche vers la droite, q doit faire un angle aigu avec n et donc vérifier $q \cdot n > 0$. Il faut donc alors définir q de sorte que $\Phi_{th} = q \cdot n$, et l'on trouve

$$q(f) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v - u|^2 (v - u) f(t, x, v) dv.$$

On peut refaire le même raisonnement dans le cas où les particules ont plus d'énergie à droite qu'à gauche, et l'on trouve la même expression pour q . De même, on pourra vérifier que cette expression ne dépend pas de l'orientation choisie pour n .

Chapitre 5

Propriétés du gaz à l'équilibre

Lorsque le gaz est à l'équilibre, nous avons vu section 2.3 que la fonction de distribution f est la maxwellienne $M[\rho, u, T]$ définie par les quantités macroscopiques ρ, u, T . Nous montrons ici qu'on peut calculer explicitement certaines quantités macroscopiques (tenseur des contraintes, flux de chaleur, vitesse thermique, vitesse du son) en fonction de ρ, u, T .

5.1 Vitesse thermique

Rappelons que la vitesse macroscopique u du gaz n'est autre que la moyenne de vitesses moléculaire (voir la définition (2.3)). On appelle vitesse d'agitation moléculaire la vitesse des molécules relativement à cette vitesse moyenne, soit la vitesse $v - u$.

On peut être tenté de se demander à quelle vitesse bougent, en moyenne, les molécules autour de leur vitesse moyenne u . Autrement dit, quelle est la vitesse d'agitation moyenne. Posé de cette façon, le problème se résoud de façon immédiate : cette vitesse d'agitation moyenne est nulle, par définition de la moyenne. Reformulons alors la question, en négligeant ces différences en direction, et intéressons-nous à l'intensité moyenne (ou la norme) de cette vitesse d'agitation.

On peut ainsi s'intéresser à l'énergie cinétique moyenne des molécules due au mouvement d'agitation. Celle-ci vaut

$$e_{th} = \frac{m}{\rho} \int_{\mathbb{R}^3} |v - u|^2 M[\rho, u, T] dv.$$

Cette intégrale peut-être calculée explicitement pour trouver $e_{th} = \frac{3}{2}mRT$. La vitesse d'un molécule qui aurait cette énergie cinétique est c_2 telle que $e_{th} = \frac{1}{2}mc_2^2$, soit

$$c_2 = \sqrt{3RT}.$$

Remarquons que ce calcul revient à définir c_2 comme l'intensité de vitesse relative en moyenne quadratique.

On peut aussi s'intéresser à l'intensité de vitesse relative en moyenne arithmétique. On définit ainsi

$$c_1 = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^3} |v - u| M[\rho, u, T] dv = \sqrt{\frac{8}{\pi}RT}.$$

On peut enfin tenter de savoir quelle est la vitesse relative (en norme) la plus probable. Commençons par calculer la distribution des intensités de vitesses relatives à l'équilibre, c'est-à-dire la fonction $\phi(\zeta)$ telle que la masse de molécules de vitesses relatives d'intensité $\zeta \pm d\zeta$ par unité de volume soit $\phi(\zeta)d\zeta$. Or la masse de molécules de vitesse $v \pm dv$ (donc de vitesse relative $(v - u) \pm dv$) par unité de volume est

$$m(v) = M[\rho, u, T](v)dv.$$

Écrivons à présent la variable $v - u$ en coordonnées polaires, soit $v - u = \zeta\omega$, où $\zeta > 0$ est l'intensité de la vitesse relative, et $\omega \in S^2$ est sa direction, et remarquons que $dv = d(v - u) = \zeta^2 d\zeta d\omega$. Alors la masse des molécules de vitesse d'intensité $\zeta \pm d\zeta$ et de direction $\omega \pm d\omega$ par unité de volume est

$$m(\zeta, \omega) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2RT}\right) \zeta^2 d\zeta d\omega.$$

On obtient enfin la masse des molécules de vitesse d'intensité $\zeta \pm d\zeta$ par unité de volume en intégrant la relation précédente sur toutes les directions possibles pour trouver

$$\begin{aligned} m(\zeta) &= \left(\int_{S^2} \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2RT}\right) \zeta^2 d\omega \right) d\zeta \\ &= 4\pi \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2RT}\right) \zeta^2 d\zeta. \end{aligned}$$

Par conséquent, la distribution des intensités des vitesses relatives à l'équilibre est $\phi(\zeta) = 4\pi \frac{\rho}{(2\pi RT)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2RT}\right) \zeta^2$. L'intensité la plus probable est celle qui maximise cette distribution, et il est facile de la calculer : on trouve

$$c_3 = \sqrt{2RT}.$$

Ces trois intensités de vitesse relative sont égales à $\alpha\sqrt{RT}$, avec α entre $\sqrt{2}$ et $\sqrt{3}$. On appelle souvent *vitesse thermique* la quantité $v_{th} = \sqrt{RT}$, qui est donc une mesure de l'intensité de la vitesse d'agitation des molécules. Elle est liée à la vitesse du son dans le gaz, qui est définie en dynamique des gaz par $v_s = \sqrt{\gamma p/\rho}$. Pour un gaz monoatomique, on a $\gamma = 5/3$, et l'on trouve $v_s = \sqrt{5/3}v_{th}$.

5.2 Tenseur des contraintes

Le tenseur des contraintes $\Sigma(f)$ a été défini par (4.2). Dans le cas où $f = M[\rho, u, T]$, on trouve

$$\Sigma(M) = \int_{\mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) M[\rho, u, T] dv.$$

Pour calculer cette intégrale, il est utile d'écrire les tenseurs en notation indicielle. Ainsi, on a

$$\begin{aligned} \Sigma_{i,j}(M) &= \int_{\mathbb{R}^3} (v_i - u_i)(v_j - u_j) M[\rho, u, T] dv \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} w_i w_j M[\rho, 0, T](w) dw, \end{aligned}$$

avec le changement de variables $v \mapsto w = v - u$. La fonction $M[\rho, 0, T](w)$ étant paire par rapport à w , on trouve $\Sigma_{i,j}(M) = 0$ si $i \neq j$.

Les éléments diagonaux peuvent se calculer directement, mais nous donnons ici une astuce très souvent utilisée pour le calcul d'intégrales en théorie cinétique. Remarquons que $M[\rho, 0, T]$ ne dépend que de la norme de w , et est donc invariante par rotation de w . Soit R la rotation qui amène l'axe des w_i sur l'axe des w_j , et posons $w' = Rw$: alors on a $dw = dw'$ (car R est orthogonale), $M[\rho, 0, T](w) = M[\rho, 0, T](w')$, et $w_j = (R^T w')_i$. On trouve donc

$$\begin{aligned}\Sigma_{i,i}(M) &= \int_{\mathbb{R}^3} w_i^2 M[\rho, 0, T](w) dw \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} w_j'^2 M[\rho, 0, T](w') dw' = \Sigma_{j,j},\end{aligned}$$

c'est-à-dire que les éléments diagonaux sont tous égaux. On peut donc écrire

$$\begin{aligned}\Sigma_{i,i}(M) &= \frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 \Sigma_{j,j} = \frac{1}{3} \int_{\mathbb{R}^3} \left(\sum_{j=1}^3 w_j^2 \right) M[\rho, 0, T](w) dw \\ &= \frac{1}{3} \int_{\mathbb{R}^3} |w|^2 M[\rho, 0, T](w) dw.\end{aligned}$$

Cette dernière intégrale se calcule par l'un des divers moyens exposés précédemment (voir l'appendice A.2.2)), et l'on trouve $\Sigma_{i,i}(M) = \rho RT = p$. Par conséquent, pour un gaz à l'équilibre, le tenseur des contraintes est diagonal et isotrope et vaut

$$\Sigma(M) = pI_3, \tag{5.1}$$

où I_3 est le tenseur identité de \mathbb{R}^3 .

5.3 Flux de chaleur

Le calcul est ici très rapide : d'après (9.6), on a

$$q(M) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2}(v - u)|v - u|^2 M[\rho, u, T] dv = 0, \tag{5.2}$$

car $M[\rho, u, T]$ est paire par rapport à $v - u$. Le flux de chaleur à l'équilibre est donc nul.

Chapitre 6

Flux à la paroi

En utilisant des arguments déjà présentés sections 3 et 4, nous calculons ici les flux de masse, quantité de mouvement, et énergie qui existent à la paroi, ce qui nous permet d'en déduire la force exercée par le gaz sur la paroi, ainsi que la chaleur échangée par le gaz avec celle-ci. Nous en tirons des formules utiles, par exemple pour le calcul des coefficients aérodynamiques (traînée, flux de chaleur, etc.).

Nous considérons donc un point x sur un élément de paroi dS , avec une normale unitaire n dirigée vers le gaz (voir la figure 3.1). En vue du calcul d'écoulements hors équilibre, il est important ici de bien faire la distinction entre la distribution f_{inc} des molécules incidentes, de vitesses dirigées vers la paroi, donc telles que $v \cdot n < 0$, et la distribution f_{ref} des molécules réfléchies par la paroi, donc de vitesses telles que $v \cdot n > 0$.

6.1 Flux de masse

Considérons à présent les molécules qui impactent un élément de paroi dS pendant dt et qui sont dans le cylindre dessiné figure 6.1.

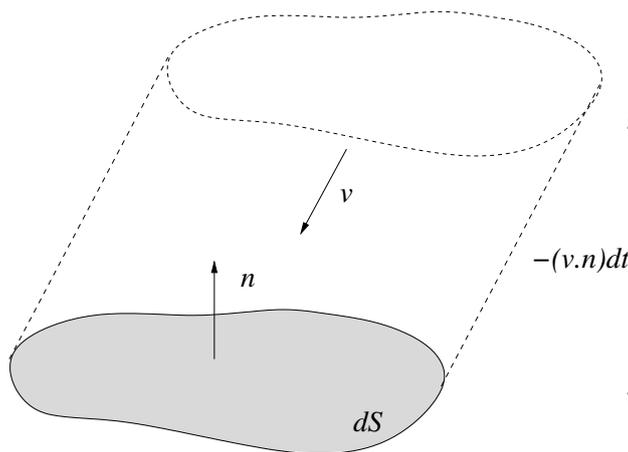


FIGURE 6.1 – Cylindre contenant les particules qui impactent dS pendant dt .

Chacune de ces molécules possède une masse m , et la somme de leurs masse (en te-

nant compte de toutes celles qui ont une vitesse dans dv autour de v) est donc $d\mathcal{M}_{inc} = f_{inc}(t, x, v) dv dx = (-v \cdot n) f_{inc}(t, x, v) dv dt dS$, par définition de la fonction de distribution. La masse totale de toutes les molécules incidentes s'obtient en intégrant $d\mathcal{M}_{inc}$ sur toutes les vitesses incidentes possibles, et l'on trouve donc la masse incidente totale qui impacte dS pendant dt

$$\mathcal{M}_{inc} = \left(\int_{v \cdot n < 0} (-v \cdot n) f_{inc}(t, x, v) dv \right) dt dS. \quad (6.1)$$

On peut calculer de même la masse des particules réfléchies :

$$\mathcal{M}_{ref} = \left(\int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) f_{ref}(t, x, v) dv \right) dt dS. \quad (6.2)$$

On peut alors définir le bilan net de masse par $\mathcal{M}_{ref} - \mathcal{M}_{inc}$, et en divisant ce bilan par $dt dS$, on obtient le *flux de masse* à la paroi, c'est-à-dire un bilan de masse par unité de temps et par unité de surface :

$$\Phi_{masse} = \int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) f_{ref}(t, x, v) dv + \int_{v \cdot n < 0} (v \cdot n) f_{inc}(t, x, v) dv.$$

Notons qu'en général, les molécules de gaz ne traversent pas la paroi et qu'en l'absence de réaction chimique à la paroi, les molécules incidentes ne sont pas piégées par elle. Cela implique que les masses incidentes \mathcal{M}_{inc} et réfléchies \mathcal{M}_{ref} sont égales, et donc que le flux de masse à la paroi doit être nul. Nous pouvons alors en tirer une information sur la vitesse macroscopique du gaz à la paroi, comme nous l'expliquons ci-dessous.

En notant de la même façon $f = f_{inc}$ pour les vitesses incidentes et $f = f_{ref}$ pour les vitesses réfléchies, on peut écrire le flux sous la forme

$$\begin{aligned} \Phi_m &= \int_{\mathbb{R}^3} (v \cdot n) f(t, x, v) dv \\ &= \left(\int_{\mathbb{R}^3} v f(t, x, v) dv \right) \cdot n \\ &= \rho u \cdot n. \end{aligned}$$

Par conséquent, la densité de quantité de mouvement ρu s'interprète comme le vecteur flux de masse (nous avons déjà établi cette propriété à la section 4.1 pour le flux de masse à travers une surface virtuelle à l'intérieur du gaz). En outre, comme le flux de masse à la paroi est nul, la relation précédente implique $\rho u \cdot n = 0$ à la paroi, et donc que $u \cdot n = 0$. Autrement dit, la composante normale à la paroi de la vitesse macroscopique du gaz est nulle, ou encore, la vitesse macroscopique du gaz est tangente à la paroi.

Notons que rien ne permet d'affirmer que la vitesse tangentielle à la paroi est nulle elle aussi, contrairement à ce qui est observé pour un gaz dense (condition d'adhérence). De fait, on peut montrer que cette vitesse tangentielle n'est pas nulle en général, et cela est une différence essentielle de comportement du gaz entre le régime raréfié et le régime dense.

6.2 Flux d'impulsion

Le même type de raisonnement permet de calculer le flux d'impulsion à la paroi, et nous avons déjà fait un calcul très proche section 4.2. Cependant, la paroi étant supposée immobile, nous faisons le calcul dans le référentiel de la paroi, et non dans celui associé à la vitesse macroscopique u . Considérons à nouveau les molécules qui impactent un élément de paroi dS pendant dt et qui sont dans le cylindre dessiné figure 3.1.

Chacune de ces molécules possède une impulsion mv , et la somme de leurs impulsions (en tenant compte de toutes celles qui ont une vitesse dans dv autour de v) est donc $d\mathcal{I}_{inc} = v f(t, x, v) dv dx = v(-v \cdot n) f(t, x, v) dv dt dS$. La somme des impulsions de toutes les molécules incidentes s'obtient en intégrant $d\mathcal{I}_{inc}$ sur toutes les vitesses incidentes possibles, et l'on trouve donc l'impulsion incidente totale transmise à dS pendant dt

$$\mathcal{I}_{inc} = \left(\int_{v \cdot n < 0} v(-v \cdot n) f_{inc}(t, x, v) dv \right) dt dS. \quad (6.3)$$

On peut calculer de même l'impulsion des particules réfléchies :

$$\mathcal{I}_{ref} = \left(\int_{v \cdot n > 0} v(v \cdot n) f_{ref}(t, x, v) dv \right) dt dS. \quad (6.4)$$

On peut alors définir le bilan net d'impulsion par $\mathcal{I}_{ref} - \mathcal{I}_{inc}$, et en divisant ce bilan par $dt dS$, on obtient le *flux d'impulsion* à la paroi, c'est-à-dire un bilan d'impulsion par unité de temps et par unité de surface :

$$\Phi_{imp} = \int_{v \cdot n > 0} v(v \cdot n) f_{ref}(t, x, v) dv + \int_{v \cdot n < 0} v(v \cdot n) f_{inc}(t, x, v) dv.$$

En utilisant la relation $a(b \cdot c) = (a \otimes b)c$ pour tout vecteurs a , b , et c , ce flux peut s'écrire

$$\Phi_{imp} = \left(\int_{v \cdot n > 0} v \otimes v f_{ref}(t, x, v) dv + \int_{v \cdot n < 0} v \otimes v f_{inc}(t, x, v) dv \right) n.$$

Le bilan d'impulsion à la paroi peut être relié à une force, comme nous l'avons déjà mentionné section 3 et l'on trouve que le gaz exerce sur la paroi la force

$$F_{gaz \rightarrow dS} = -\Phi_{imp} dS = - \left(\int_{v \cdot n > 0} v \otimes v f_{ref}(t, x, v) dv + \int_{v \cdot n < 0} v \otimes v f_{inc}(t, x, v) dv \right) n dS.$$

On peut alors en déduire la pression exercée par le gaz sur la paroi, qui est la composante normale de $F_{gaz \rightarrow dS}/dS$ (avec un signe $-$ pour que la pression soit positive), soit

$$p = \int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n)^2 f_{ref}(t, x, v) dv + \int_{v \cdot n < 0} (v \cdot n)^2 f_{inc}(t, x, v) dv. \quad (6.5)$$

De même, la contrainte tangentielle dans la direction τ est

$$\sigma = \int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n)(v \cdot \tau) f_{ref}(t, x, v) dv + \int_{v \cdot n < 0} (v \cdot n)(v \cdot \tau) f_{inc}(t, x, v) dv. \quad (6.6)$$

Exercice 6.1. Montrer que la force exercée par le gaz sur la paroi peut aussi s'écrire $F_{gaz \rightarrow dS} = -\Sigma ndS$, où Σ est le tenseur des contraintes à la paroi, défini par

$$\Sigma = \int_{v \cdot n > 0} (v - u) \otimes (v - u) f_{ref}(t, x, v) dv + \int_{v \cdot n < 0} (v - u) \otimes (v - u) f_{inc}(t, x, v) dv,$$

et u est la vitesse à la paroi définie dans le calcul du flux de masse.

Solution. En effet, pour simplifier les calculs, commençons par utiliser la même notation pour les distributions de molécules incidentes et réfléchies, soit $f = f_{inc}$ pour les vitesses incidentes et $f = f_{ref}$ pour les vitesses réfléchies. On a alors

$$F_{gaz \rightarrow dS} = - \left(\int_{\mathbb{R}^3} v \otimes v f(t, x, v) dv \right) ndS.$$

On utilise ensuite la décomposition $v = u + (v - u)$ pour trouver

$$\begin{aligned} F_{gaz \rightarrow dS} &= - \left(\int_{\mathbb{R}^3} (u + (v - u)) \otimes (u + (v - u)) f(t, x, v) dv \right) dS \cdot n \\ &= - \left(u \otimes u \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) dv + u \otimes \int_{\mathbb{R}^3} (v - u) f(t, x, v) dv \right. \\ &\quad \left. + \int_{\mathbb{R}^3} (v - u) f(t, x, v) dv \otimes u + \int_{\mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) f(t, x, v) dv \right) ndS \\ &= - \left(\rho u \otimes u + \int_{\mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) f(t, x, v) dv \right) ndS \\ &= - \left(\int_{\mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) f(t, x, v) dv \right) ndS \\ &= \int_{v \cdot n > 0} (v - u) \otimes (v - u) f_{ref}(t, x, v) dv + \int_{v \cdot n < 0} (v - u) \otimes (v - u) f_{inc}(t, x, v) dv \\ &= -\Sigma ndS, \end{aligned}$$

où nous avons utilisé le fait que $\int_{\mathbb{R}^3} f dv = \rho$, $\int_{\mathbb{R}^3} v f dv = \rho u$ et la relation $u \cdot n = 0$ démontrée à la section précédente, ainsi que la relation $a(b \cdot c) = (a \otimes b)c$.

Il faut donc retenir que si l'on connaît la distribution des molécules de gaz à la paroi (molécules incidentes et réfléchies), on peut calculer la force que le gaz exerce sur le morceau de paroi dS , et celle-ci vaut $F_{gaz \rightarrow dS} = -\Sigma ndS$ où Σ est défini ci-dessus. Attention à l'orientation de la normale : si celle-ci est prise dirigée vers l'extérieur du gaz, alors on retrouve la forme plus familière $F_{gaz \rightarrow dS} = \Sigma ndS$.

6.3 Flux de chaleur

Le même raisonnement suivi pas à pas en remplaçant la masse ou l'impulsion par l'énergie cinétique donne les quantités d'énergie des molécules quittant ou impactant l'élément de paroi dS pendant dt

$$\mathcal{E}_{ref} = \int_{v \cdot n > 0} \frac{1}{2} |v|^2 (v \cdot n) f_{ref} dv, \quad \text{et} \quad \mathcal{E}_{inc} = \int_{v \cdot n < 0} \frac{1}{2} |v|^2 (-v \cdot n) f_{inc} dv,$$

d'où le flux d'énergie à la paroi

$$\begin{aligned}\Phi_{\text{energie}} &= \frac{\mathcal{E}_{\text{ref}} - \mathcal{E}_{\text{inc}}}{dt dS} \\ &= \int_{v \cdot n > 0} \frac{1}{2} |v|^2 (v \cdot n) f_{\text{ref}} dv + \int_{v \cdot n < 0} \frac{1}{2} |v|^2 (-v \cdot n) f_{\text{inc}} dv.\end{aligned}\quad (6.7)$$

En utilisant à nouveau la décomposition $v = u + (v - u)$, on trouve l'expression simplifiée

$$\Phi_{\text{energie}} = (\Sigma u) \cdot n + \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v - u|^2 (v - u) \cdot n f dv,$$

où Σ est le tenseur des contraintes à la paroi défini précédemment.

Pour interpréter les deux termes de ce flux, notons que la variation d'énergie du gaz à la paroi est

$$\frac{d\mathcal{E}}{dt} = \Phi_{\text{energie}} dS = (\Sigma u) \cdot n dS + \left(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v - u|^2 (v - u) \cdot n f dv \right) dS.$$

Le premier terme représente le travail de la force exercée par le gaz sur la paroi. D'après la deuxième loi de la thermodynamique, le deuxième terme représente donc un échange de chaleur avec la paroi. Ce terme peut s'écrire $q \cdot n dS$ où q est le vecteur flux de chaleur défini section 4.3 par

$$q = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v - u|^2 (v - u) f dv.$$

Attention, le flux défini par q est le flux de chaleur dans le gaz : le flux de chaleur reçue par la paroi est bien la somme $(\Sigma u) \cdot n + q \cdot n$, car la paroi étant fixe, le travail dû à la force exercée par le gaz est transformée en chaleur dans le solide, qui s'ajoute à la chaleur directement transmise par le gaz.

Chapitre 7

Interaction gaz-paroi solide

Dans cette section, nous décrivons des modèles simples qui rendent compte du phénomène de réflexion des molécules avec une paroi solide. Ce concept est essentiel à la description de tout écoulement de gaz dans un milieu contenant des parois solides, comme en aérodynamique.

Modéliser la façon dont la paroi réfléchit les molécules de gaz incidentes est un sujet très complexe, car cette réflexion dépend, a priori, de la nature du matériau constituant la paroi (lisse, rugueuse, etc.), de son état (chaud, froid), et de son mouvement.

Dans ce problème, nous souhaitons déterminer l'état des molécules après réflexion, connaissant leur état avant la collision avec la paroi. Considérons une paroi solide quelconque, localisons un point x sur cette paroi, et notons n le vecteur normal (et unitaire) à la paroi, dirigé vers le gaz. D'un point de vue cinétique, nous supposons connue la fonction de distribution des molécules incidentes, soit $f_{inc}(t, x, v)$ pour toutes les vitesses dirigées vers la paroi, c'est-à-dire telles que $v \cdot n < 0$. Le problème est maintenant de déterminer la fonction de distribution des molécules réfléchies, soit $f_{ref}(t, x, v)$ pour toutes les vitesses dirigées vers le gaz, c'est-à-dire telles que $v \cdot n > 0$. Le problème consiste donc à définir f_{ref} en fonction de f_{inc} .

Dans cette section, nous présentons trois modèles relativement simples, dues à Maxwell [8], le dernier étant encore un de ceux le plus utilisé actuellement.

7.1 Réflexion spéculaire

Le premier modèle de réflexion, dite *spéculaire*, modélise la réflexion des molécules sur la paroi par un rebond élastique, tel celui d'une boule de billard : toute molécule heurtant la paroi est réfléchiée dans la direction symétrique par rapport à la normale à la paroi, avec la même norme de vitesse (voir figure 7.1). Cette réflexion se traduit ainsi pour la fonction de distribution : la distribution des molécules réfléchies est égale à la distribution des molécules incidentes, et l'on a pour tout v tel que $v \cdot n > 0$:

$$f_{ref}(t, x, v) = f_{inc}(t, x, Rv), \quad \text{avec } Rv = v - 2(v \cdot n)n, \quad (7.1)$$

où Rv est le symétrique de v par rapport au plan P orthogonal à n .

Nous pouvons à présent vérifier que le flux de masse à la paroi est bien nul, comme attendu.

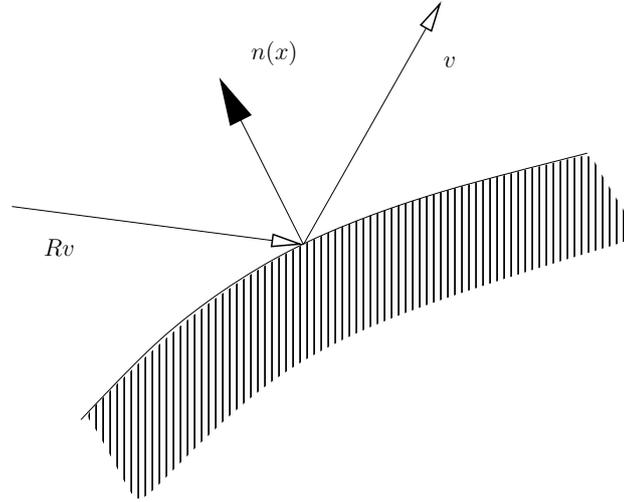


FIGURE 7.1 – Réflexion spéculaire

Propriété 7.1. Si f_{inc} et f_{ref} sont liées par la condition de réflexion spéculaire (7.1), alors le flux de masse Φ_m (défini par (4.1)) est nul.

Démonstration. Rappelons que le flux de masse vaut

$$\Phi_{masse} = \underbrace{\int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) f_{ref}(t, x, v) dv}_{\text{flux réfléchi}} - \underbrace{\int_{v \cdot n < 0} (-v \cdot n) f_{inc}(t, x, v) dv}_{\text{flux incident}} = 0.$$

Utilisons la relation spéculaire (7.1) pour écrire le flux réfléchi sous la forme

$$\text{flux de masse réfléchi} = \int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) f_{ref}(t, x, v) dv = \int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) f_{inc}(t, x, Rv) dv.$$

Effectuons alors le changement de variables $v \mapsto v' = Rv$: cette transformation est orthogonale (c'est une symétrie), donc $dv = dv'$. De plus, R est inversible et égale à son inverse, de sorte que $v = Rv'$ et donc $v \cdot n = Rv' \cdot n = -v' \cdot n$. Le flux de masse réfléchi devient donc

$$\text{flux de masse réfléchi} = \int_{v' \cdot n < 0} (-v' \cdot n) f_{inc}(t, x, v') dv' = \text{flux de masse incident},$$

d'où $\Phi_m = 0$. □

Cependant, cette modélisation ne peut pas rendre compte de transfert de chaleur entre le gaz et la paroi : en effet, on peut montrer, par la même analyse que celle donnée ci-dessus, que les flux d'énergie incidents et réfléchis sont égaux (voir l'exercice 7.1). C'est pour cette raison que Maxwell a introduit le modèle de réflexion diffuse.

7.2 Réflexion diffuse

Supposons que la paroi a une température T_w au point x . Supposons en outre que les molécules incidentes interagissent avec la paroi (de façon quasi instantanée) et sont ré-émises

dans des directions aléatoires, avec une vitesse nulle en moyenne, selon une loi gaussienne d'écart type $\sqrt{RT_w}$. Autrement dit, la distribution des molécules réfléchies est une maxwellienne : pour tout v tel que $v \cdot n > 0$, on a

$$f_{ref}(t, x, v) = M[\rho_{ref}, 0, T_w](v), \quad (7.2)$$

et le paramètre ρ_{ref} , qui est la densité de masse de molécules réfléchies, est déterminé de façon à ce que le flux de masse à travers la paroi soit nul, comme pour la réflexion spéculaire. En remarquant que

$$M[\rho_{ref}, 0, T_w](v) = \frac{\rho_{ref}}{(2\pi RT_w)^{3/2}} \exp\left(-\frac{|v|^2}{2RT_w}\right) = \rho_{ref} M[1, 0, T_w](v)$$

et en utilisant la relation de flux nul $\Phi_m = 0$, on trouve facilement

$$\rho_{ref} = \frac{\int_{v \cdot n < 0} (-v \cdot n) f_{inc}(t, x, v) dv}{\int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) M[1, 0, T_w] dv}. \quad (7.3)$$

En quelque sorte, avec ce modèle, on considère que les molécules incidentes sont instantanément thermalisées avec la paroi et sont ré-émise dans toutes les directions. Attention cependant, la température du gaz à la paroi n'est pas T_w : en effet, la condition diffuse ne prescrit que la distribution des molécules réfléchies, et l'on ne sait rien sur les particules incidentes (voir l'exercice 7.3). Il y a donc bien un échange de chaleur entre le gaz et la paroi, comme le montre un calcul direct (voir section 6.3).

7.3 Réflexion avec accommodation partielle

Enfin, Maxwell a proposé de combiner les deux réflexions précédentes pour obtenir la condition de réflexion suivante : pour tout v tel que $v \cdot n > 0$, on pose

$$f_{ref}(t, x, v) = (1 - \alpha) f_{inc}(t, x, Rv) + \alpha M[\rho_{ref}, 0, T_w](v), \quad (7.4)$$

où α est un paramètre entre 0 et 1, parfois appelé *coefficient d'accommodation*, qui dépend du type de paroi considéré. La définition (7.3) assure là-encore un flux de masse nul à travers la paroi, mais elle permet un flux d'énergie non nul, et donc un échange de chaleur entre le gaz et la paroi.

D'autres conditions plus complexes ont été mises au point, mais la condition d'accommodation reste encore aujourd'hui la plus employée. Cependant, elle n'est pas toujours satisfaisante, et la modélisation de l'interaction gaz-paroi est toujours un domaine de recherche à l'heure actuelle.

Exercice 7.1. Montrer que dans le cas de la réflexion spéculaire, le flux d'énergie à la paroi défini par (6.7) est nul.

Exercice 7.2. Montrer que si $f = M[\rho, 0, T_w]$, où ρ est une densité quelconque et T_w est la température de la paroi, alors f satisfait la relation (7.4). Autrement dit, le modèle de réflexion avec accommodation partielle est bien compatible avec un gaz à l'équilibre avec la paroi.

Exercice 7.3. On suppose que la distribution des particules incidentes est $f_{inc} = M[\rho, 0, T_a]$, où T_a est une température différente de T_w . Calculer alors la température du gaz à la paroi, et montrez qu'elle n'est égale ni à T_a , ni à T_w .

Exercice 7.4. Formuler une extension des conditions de réflexion précédentes dans le cas où la paroi solide est animée d'une vitesse u_w non nulle.

Chapitre 8

Calculs en régime moléculaire libre

Le régime moléculaire libre est celui rencontré par les satellites (altitude supérieure à 200 km) : le libre parcours moyen de l'air est tellement grand que l'on peut considérer que les molécules impactant les parois du satellite sont dans un état non perturbé par des collisions avec d'autres molécules. En d'autres termes, la distribution des molécules qui arrivent sur la paroi est supposée être la maxwellienne $M[\rho_\infty, 0, T_\infty]$, où ρ_∞ et T_∞ sont la densité et la température de l'atmosphère rencontrée par le satellite.

Cette hypothèse et le choix d'une condition de réflexion à la paroi permettent le calcul analytique de certaines quantités aérodynamiques utiles, comme le coefficient de pression ou de frottement, ainsi que le flux de chaleur.

À titre d'exemple, nous traitons ici du calcul de la pression exercée par l'atmosphère raréfiée sur un satellite sphérique se déplaçant avec une vitesse donnée u_S . Dans le référentiel du satellite, celui-ci rencontre du gaz de densité et température ρ_∞ et T_∞ et de vitesse u_∞ , qui est l'opposée de la vitesse u_S du satellite dans le référentiel terrestre (voir figure 8.1).

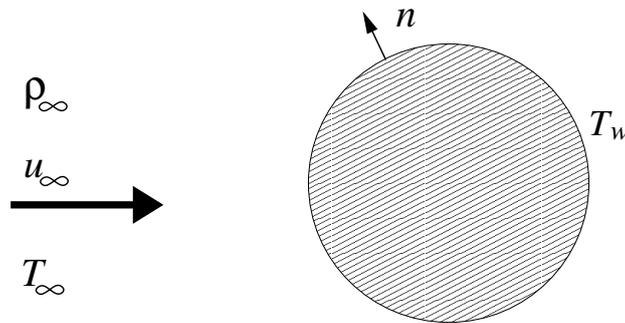


FIGURE 8.1 – Satellite en mouvement et gaz environnant

Pour calculer la pression qui s'exerce en un point x de la paroi, nous définissons n la normale unitaire à la paroi dirigée vers l'extérieur. Nous avons montré section (section 6, équation (6.5)) que la pression exercée par le gaz à la paroi vaut

$$p = \int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n)^2 f_{ref} dv + \int_{v \cdot n < 0} (v \cdot n)^2 f_{inc} dv. \quad (8.1)$$

La distribution des particules incidentes, dans le référentiel du satellite, est

$$f_{inc} = M[\rho_\infty, u_\infty, T_\infty],$$

La distribution des molécules réfléchies est définie par le choix d'un modèle d'interaction gaz paroi. Pour simplifier, considérons le modèle de réflexion diffuse (7.2)–(7.3), rappelé ici pour plus de clarté

$$f_{ref} = M[\rho_{ref}, 0, T_w](v),$$

avec $M[\rho_{ref}, 0, T_w](v) = \frac{\rho_{ref}}{(2\pi RT_w)^{3/2}} \exp(-\frac{|v|^2}{2RT_w}) = \rho_{ref} M[1, 0, T_w](v)$ et la densité de masse des molécules réfléchies

$$\rho_{ref} = \frac{\int_{v \cdot n < 0} (-v \cdot n) f_{inc}(t, x, v) dv}{\int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) M[1, 0, T_w] dv}. \quad (8.2)$$

Le calcul de la pression nécessite donc tout d'abord le calcul du flux de masse incident (numérateur de l'expression donnant ρ_{ref}) et le calcul du flux réfléchi présent au dénominateur, afin de déterminer complètement la distribution f_{ref} . Nous pourrions ensuite calculer les flux d'impulsion incident et réfléchi nécessaires à (8.1). Noter que toutes les autres quantités d'intérêt (cisaillement, flux de chaleur) se calculent de la même façon.

8.1 Calcul des flux de masse incident et réfléchi

Flux de masse incident

Le numérateur de (8.2) est le flux de masse incident

$$\Phi_{m,inc} = \int_{v \cdot n < 0} (-v \cdot n) f_{inc} dv = \int_{v \cdot n < 0} (-v \cdot n) M[\rho_\infty, u_\infty, T_\infty] dv. \quad (8.3)$$

Pour calculer cette intégrale, on effectue un premier changement de variable pour se placer dans le repère local (n, t_1, t_2) où n est le vecteur unitaire normal à la paroi en un point x et t_1 et t_2 sont deux vecteurs tangents orthogonaux. On définit ainsi la variable de vitesse $v' = (v_n, v_{t1}, v_{t2})$ où $v_n = v \cdot n$, et le vecteur $u'_\infty = (u_{\infty,n}, u_{\infty,t1}, u_{\infty,t2})$, avec $u_{\infty,n} = u_\infty \cdot n$, les composantes tangencielles étant définies de la même façon que les composantes normales. Le jacobien de cette transformation vaut 1, et l'intégrale vaut donc :

$$\begin{aligned} \Phi_{m,inc} &= \int_{v_n < 0} -v_n \frac{\rho_\infty}{(2\pi RT_\infty)^{3/2}} \exp\left(-\frac{|v' - u'_\infty|^2}{2RT_\infty}\right) dv' \\ &= \int_{-\infty}^0 -v_n \frac{\rho_\infty}{\sqrt{2\pi RT_\infty}} \exp\left(-\frac{(v_n - u_{\infty,n})^2}{2RT_\infty}\right) dv_n \\ &\quad \times \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{2\pi RT_\infty} \exp\left(-\frac{(v_{t1} - u_{\infty,t1})^2 + (v_{t2} - u_{\infty,t2})^2}{2RT_\infty}\right) dv_{t1} dv_{t2}. \end{aligned}$$

L'intégrale double par rapport à v_{t1} et v_{t2} donne 1 (voir l'appendice A.2.2), et il reste donc

$$\Phi_{m,inc} = \int_{-\infty}^0 -v_n \frac{\rho_\infty}{\sqrt{2\pi RT_\infty}} \exp\left(-\frac{(v_n - u_{\infty,n})^2}{2RT_\infty}\right) dv_n.$$

On introduit ensuite la nouvelle variable $c = v_n - u_{\infty,n}$, de sorte que l'intégrale précédente s'écrive

$$\Phi_{m,inc} = \int_{-\infty}^{-u_{\infty,n}} -(c + u_{\infty,n}) \frac{\rho_{\infty}}{\sqrt{2\pi RT_{\infty}}} \exp\left(-\frac{c^2}{2RT_{\infty}}\right) dc, \quad (8.4)$$

Le terme en c s'intègre facilement (on reconnaît la dérivée de $\exp\left(-\frac{c^2}{2RT_{\infty}}\right)$) et donne

$$\int_{-\infty}^{-u_{\infty,n}} -c \frac{\rho_{\infty}}{\sqrt{2\pi RT_{\infty}}} \exp\left(-\frac{c^2}{2RT_{\infty}}\right) dc = \frac{\rho_{\infty}}{\sqrt{2\pi RT_{\infty}}} RT_{\infty} e^{-\frac{u_{\infty,n}^2}{2RT_{\infty}}} = \frac{\rho_{\infty}}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{RT_{\infty}} e^{-s_n^2},$$

où l'on a introduit la notation classique

$$s_n = -\frac{u_{\infty,n}}{\sqrt{2RT_{\infty}}},$$

qui peut être interprété comme un nombre de Mach de l'écoulement incident, calculé dans la direction n . Le deuxième terme de (8.4) se calcule en changeant une dernière fois de variables avec $r = c/\sqrt{2RT_{\infty}}$. On trouve alors

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{-u_{\infty,n}} -u_{\infty,n} \frac{\rho_{\infty}}{\sqrt{2\pi RT_{\infty}}} \exp\left(-\frac{c^2}{2RT_{\infty}}\right) dc &= -u_{\infty,n} \int_{-\infty}^{s_n} \frac{\rho_{\infty}}{\sqrt{\pi}} e^{-r^2} dr \\ &= -\rho_{\infty} u_{\infty,n} \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\int_{-\infty}^0 e^{-r^2} dr + \int_0^{s_n} e^{-r^2} dr \right) \\ &= -\frac{1}{2} \rho_{\infty} u_{\infty,n} (1 + \operatorname{erf}(s_n)), \end{aligned}$$

où nous avons utilisé la fonction spéciale $\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$, dite *fonction d'erreur*, pour laquelle on a en particulier $\operatorname{erf}(+\infty) = 1$.

En réunissant ces deux termes dans (8.4), et en exprimant $u_{\infty,n}$ en fonction de s_n dans le deuxième terme, nous obtenons donc l'expression finale du flux de masse incident :

$$\Phi_{m,inc} = \rho_{\infty} \sqrt{\frac{RT_{\infty}}{2\pi}} \left(e^{-s_n^2} + \sqrt{\pi} s_n (1 + \operatorname{erf}(s_n)) \right). \quad (8.5)$$

Flux de masse réfléchi

Le dénominateur de (8.2) est un flux de masse réfléchi (pour une densité unité). Le calcul de ce terme se fait avec les mêmes outils que le calcul précédent, mais est beaucoup plus simple, du fait que la vitesse de paroi est nulle. On trouve

$$\int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) M[1, 0, T_w] dv = \sqrt{\frac{RT_w}{2\pi}}. \quad (8.6)$$

Densité de masse des molécules réfléchies

Finalement, en injectant (8.5) et (8.6) dans (8.2), on trouve donc l'expression de la densité de masse des molécules réfléchies

$$\rho_{ref} = \rho_{\infty} \sqrt{\frac{T_{\infty}}{T_w}} \left(e^{-s_n^2} + \sqrt{\pi} s_n (1 + \operatorname{erf}(s_n)) \right). \quad (8.7)$$

8.2 Calcul de la pression

Nous pouvons à présent passer au calcul de la pression : les deux intégrales de la formule (8.1) sont les composantes normales des flux d'impulsion réfléchi et incident, calculés ci-dessous.

Flux d'impulsion réfléchi

La composante normale du flux d'impulsion réfléchi est

$$\begin{aligned}
\Phi_{imp,ref} \cdot n &= \int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n)^2 f_{ref}(v) dv \\
&= \rho_{ref} \int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n)^2 M[1, 0, T_w](v) dv \\
&= \rho_{ref} \int_{v_n > 0} v_n^2 M[1, 0, T_w](v') dv' \\
&= \rho_{ref} \frac{1}{2} RT_w \\
&= \frac{1}{2} \rho_\infty R \sqrt{T_\infty T_w} \left(e^{-s_n^2} + \sqrt{\pi} s_n (1 + \operatorname{erf}(s_n)) \right),
\end{aligned}$$

où l'on a utilisé successivement le changement de variable $v \mapsto v'$ dans le repère local (n, t_1, t_2) , la parité de $M[1, 0, T_w]$ par rapport à v , une intégrale gaussienne, et la formule (8.7) de ρ_{ref} .

Flux d'impulsion incident

En utilisant les mêmes changements de variables, la composante normale du flux d'impulsion réfléchi (ou plutôt son opposé) donne

$$\begin{aligned}
-\Phi_{imp,inc} \cdot n &= \int_{v \cdot n < 0} (v \cdot n)^2 f_{inc}(v) dv \\
&= \int_{v \cdot n < 0} (v \cdot n)^2 M[\rho_\infty, u_\infty, T_\infty](v) dv \\
&= \int_{v_n < 0} v_n^2 M[\rho_\infty, u_\infty, T_\infty](v') dv' \\
&= \int_{-\infty}^0 v_n^2 \frac{\rho_\infty}{\sqrt{2\pi RT_\infty}} \exp\left(-\frac{(v_n - u_{\infty,n})^2}{2RT_\infty}\right) dv_n \\
&= \rho_\infty \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{s_n} (\sqrt{2RT_\infty} r + u_{\infty,n})^2 e^{-r^2} dr \\
&= \rho_\infty \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\underbrace{2RT_\infty \int_{-\infty}^{s_n} r^2 e^{-r^2} dr}_{I_1} + \underbrace{2u_{\infty,n} \sqrt{2RT_\infty} \int_{-\infty}^{s_n} r e^{-r^2} dr}_{I_2} + \underbrace{u_{\infty,n}^2 \int_{-\infty}^{s_n} e^{-r^2} dr}_{I_3} \right).
\end{aligned}$$

Pour la troisième intégrale, on fait apparaître la fonction erf en notant que

$$I_3 = \int_{-\infty}^0 e^{-r^2} dr + \int_0^{s_n} e^{-r^2} dr = \frac{\sqrt{\pi}}{2} (1 + \operatorname{erf}(s_n)).$$

La deuxième intégrale est celle d'une dérivée, elle se calcule donc directement :

$$I_2 = \int_{-\infty}^{s_n} r e^{-r^2} dr = \left[-\frac{1}{2} e^{-r^2} \right]_{-\infty}^{s_n} = -\frac{1}{2} s_n e^{-s_n^2}.$$

La première intégrale nécessite une intégration par parties :

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_{-\infty}^{s_n} r^2 e^{-r^2} dr = \int_{-\infty}^{s_n} r \frac{d}{dr} \left(-\frac{1}{2} e^{-r^2} \right) dr \\ &= \left[-\frac{1}{2} r e^{-r^2} \right]_{-\infty}^{s_n} + \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{s_n} e^{-r^2} dr \\ &= \frac{1}{2} \left(-s_n e^{-s_n^2} + \frac{\sqrt{\pi}}{2} (1 + \operatorname{erf}(s_n)) \right). \end{aligned}$$

Finalement, en rassemblant ces termes, et en exprimant systématiquement $u_{\infty,n}$ en fonction de s_n , on trouve

$$-\Phi_{imp,inc} \cdot n = \rho_{\infty} R T_{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} s_n e^{-s_n^2} + (1 + \operatorname{erf}(s_n)) \left(\frac{1}{2} + s_n^2 \right) \right).$$

Bilan : pression à la paroi

Finalement, nous reportons les expressions de ces deux flux d'impulsion dans (8.1) pour trouver

$$\begin{aligned} p &= \Phi_{imp,ref} \cdot n - \Phi_{imp,inc} \cdot n \\ &= \frac{1}{2} \rho_{\infty} R \sqrt{T_{\infty} T_w} \left(e^{-s_n^2} + \sqrt{\pi} s_n (1 + \operatorname{erf}(s_n)) \right) \\ &\quad + \rho_{\infty} R T_{\infty} \left(\frac{1}{\sqrt{\pi}} s_n e^{-s_n^2} + \left(\frac{1}{2} + s_n^2 \right) (1 + \operatorname{erf}(s_n)) \right). \end{aligned}$$

La vitesse du satellite étant très élevée, on a $s_n \gg 1$, et on voit donc que la pression se comporte comme $p = \rho_{\infty} R T_{\infty} \times 2s_n^2 = \rho_{\infty} u_{\infty,n}^2$, et l'on retrouve ainsi une loi connue comme le modèle de pression de Newton.

Exercice 8.1. Calculer de la même façon le cisaillement à la paroi dans une direction t_1 , ainsi que le flux d'énergie.

Chapitre 9

Modèles de collisions entre molécules pour le régime raréfié

Jusqu'à présent, nous n'avons considéré que des situations dans lesquelles la fonction de distribution du gaz est maxwellienne : soit parce que le gaz est à l'équilibre, soit parce que le gaz est en régime moléculaire libre.

Lorsque le libre parcours moyen est du même ordre que la dimension de l'objet en contact avec le gaz, l'effet des collisions entre molécules ne peut plus être négligé. La fonction de distribution n'est alors plus maxwellienne et évolue dans le temps et dans l'espace : le gaz est dit hors équilibre. Pour connaître cette distribution, il faut donc se donner une équation d'évolution, appelée équation de Boltzmann.

9.1 Équation de Boltzmann

Considérons une molécule de gaz de vitesse v et de position x à l'instant t . À l'instant $t + \delta t$, si cette molécule n'a pas subi de collision, elle aura toujours la même vitesse et sa position sera $x + v\delta t$. Comme nous l'avons vu, la masse des molécules dans un petit volume dx autour de x et de vitesse dans dv autour de v à l'instant t est $f(t, x, v) dv dx$. Après l'intervalle de temps δt , ces molécules (si elles n'ont pas subi de collisions) auront les mêmes vitesses, et seront dans un petit volume $dx dv$ autour de $x + v\delta t$ et v : la masse de ces molécules est donc $f(t + \delta t, x + v\delta t, v) dv dx$. Si l'on fait la différence entre ces deux masses, on trouve 0, car en l'absence de ces collisions, toutes les molécules sont passées du premier volume au deuxième.

Par contre, s'il y a des collisions, ces deux masses sont différentes : les collisions ayant pour effet de modifier la vitesse des molécules qui se rencontrent, les vitesses de certaines molécules ne sera plus dans dv après collision, et ces molécules ne seront plus comptées dans la masse considérée. On va donc écrire

$$f(t + \delta t, x + v\delta t, v) dv dx - f(t, x, v) dv dx = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} dv dx \delta t,$$

où le membre de droite représente le taux de variation de masse des molécules considérées. Ce taux sera donné plus loin.

En divisant par $dvdx$ et par δt , puis en faisant tendre celui-ci vers 0, le membre de gauche fait apparaître

$$\lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{f(t + \delta t, x + v\delta t, v) - f(t, x, v)}{\delta t} = \phi'(0),$$

où $\phi(\delta t) = f(t + \delta t, x + v\delta t, v)$. La dérivée de ϕ se calcule aisément, et l'on trouve $\phi'(0) = \partial_t f + v \cdot \nabla_x f$ ¹. Ainsi, on obtient la relation

$$\partial_t f(t, x, v) + v \cdot \nabla_x f(t, x, v) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}}.$$

Le membre de gauche est l'opérateur d'advection à la vitesse v appliqué à f . Le membre de droite sera maintenant noté $Q(f(t, x, \cdot))(v)$ et modélise donc la variation des vitesses des molécules dues aux collisions : en un point x de l'espace, pour chaque vitesse v , il dépend de la valeur de la distribution en toutes les autres vitesses. C'est donc un opérateur local en espace, et global en vitesse. Une expression précise de cet opérateur de collision Q a été donnée par Boltzmann, et nous renvoyons à l'annexe A.4 pour des détails.

L'équation de Boltzmann est à présent complète et s'écrit :

$$(\partial_t f + v \cdot \nabla_x f)(t, x, v) = Q(f(t, x, \cdot))(v). \quad (9.1)$$

9.2 Propriétés de l'opérateur de collision

Même si nous ne donnons pas encore de forme précise à $Q(f)$, les propriétés suivantes suffisent à établir le lien entre l'évolution microscopique et macroscopique du gaz, comme nous le verrons dans la section suivante. Pour simplifier les expressions suivantes, nous utiliserons désormais la notation $\langle \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v) dv$ pour toute fonction ϕ de v , à valeur scalaire, vectorielle, ou tensorielle.

La première hypothèse est une propriété de conservation : elle vient du fait que la théorie cinétique classique considère que les seules collisions à prendre en compte sont les collisions binaires, lors desquelles la masse, la quantité de mouvement, et l'énergie cinétique d'une paire de particules entrant en collision ne changent pas.

Hypothèse 9.1. *L'opérateur de collision satisfait les relations suivantes, pour toute fonction f :*

$$\langle Q(f) \rangle = 0, \quad \langle vQ(f) \rangle = 0, \quad \langle \frac{1}{2}|v|^2 Q(f) \rangle = 0. \quad (9.2)$$

Cette hypothèse permet d'écrire les lois d'évolution des quantités macroscopiques, appelées lois de conservation (voir la section 9.3)

La deuxième hypothèse est appelée "théorème H de Boltzmann". Elle postule l'existence d'une quantité qui diminue à cause des collisions.

Hypothèse 9.2. *Quelle que soit la fonction f positive, on a*

$$\langle Q(f) \ln f \rangle \leq 0. \quad (9.3)$$

1. Comme f dépend à la fois de x et de v , le gradient par rapport à x sera dorénavant noté ∇_x pour éviter toute confusion.

La troisième est une propriété d'équilibre.

Hypothèse 9.3.

$$Q(f) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \langle Q(f) \ln f \rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad f = M[\rho, u, T].$$

Ces deux dernières hypothèses sont fondamentales : ce sont elles qui permettent de montrer la convergence en temps du gaz vers un état d'équilibre, et de caractériser sa distribution (voir la section 9.4).

9.3 Lien cinétique/macroscopique : les lois de conservation

Commençons par voir quelle est la conséquence de l'hypothèse de conservation 9.1 page 50 sur l'évolution au cours du temps des quantités macroscopiques, dans le cas d'un gaz homogène en espace (c'est-à-dire dont les quantités sont toutes indépendantes de x).

Propriété 9.1. *Si f est solution de l'équation de Boltzmann homogène en espace :*

$$\partial_t f = Q(f), \tag{9.4}$$

alors les quantités macroscopiques de f sont constantes : $(\rho(t), u(t), T(t)) = (\rho(0), u(0), T(0))$ pour tout t .

Démonstration. Multiplions (9.4) par 1, v , et $\frac{1}{2}|v|^2$, intégrons en vitesse, et utilisons (9.2) pour trouver :

$$\partial_t \langle (1, v, \frac{1}{2}|v|^2)^T f \rangle = \langle (1, v, \frac{1}{2}|v|^2)^T Q(f) \rangle = 0,$$

ce qui implique que les moments de f (qui sont ρ , ρu , et E) sont constants au cours du temps. Par conséquent, la densité de masse, la vitesse, et la température associées sont aussi constantes. \square

Voyons maintenant comment cette analyse s'étend au cas d'un gaz non homogène.

Propriété 9.2. *Si f est une solution de l'équation de Boltzmann, alors elle satisfait les lois de conservation locales*

$$\begin{aligned} \partial_t \langle f \rangle + \nabla \cdot \langle v f \rangle &= 0, \\ \partial_t \langle v f \rangle + \nabla \cdot \langle v \otimes v f \rangle &= 0, \\ \partial_t \langle \frac{1}{2}|v|^2 f \rangle + \nabla \cdot \langle \frac{1}{2}v|v|^2 f \rangle &= 0. \end{aligned}$$

Démonstration. Il suffit de multiplier l'équation de Boltzmann (9.1) par 1, v , $\frac{1}{2}|v|^2$ et d'intégrer par rapport à v : la propriété de conservation (9.2) permet d'obtenir le résultat. \square

Comme on l'a vu, les quantités $\langle (1, v, \frac{1}{2}|v|^2) f \rangle$ sont les densité de masse, quantité de mouvement, et énergie. Les quantités $\langle v((1, v, \frac{1}{2}|v|^2)) f \rangle$ sont appelés les *flux* de masse, quantité de mouvement et énergie. La proposition suivante donne une décomposition utile de ces flux.

Propriété 9.3. *les flux de quantité de mouvement et d'énergie se décomposent en*

$$\begin{aligned}\langle v \otimes v f \rangle &= \rho u \otimes u + \Sigma(f), \\ \langle \tfrac{1}{2} v |v|^2 f \rangle &= Eu + \Sigma(f)u + q(f),\end{aligned}$$

où $\Sigma(f)$ est le tenseur des contraintes, donné par

$$\Sigma(f) = \langle (v - u) \otimes (v - u) f \rangle \quad (9.5)$$

et $q(f)$ est le flux de chaleur, donné par

$$q(f) = \langle \tfrac{1}{2} (v - u) |v - u|^2 f \rangle \quad (9.6)$$

Démonstration. Commençons par le flux de quantité de mouvement : décomposons la vitesse moléculaire v en $v = u + (v - u)$ (vitesse macroscopique plus vitesse relative), et développons l'expression du flux pour trouver

$$\begin{aligned}\langle v \otimes v f \rangle &= \langle (v - u) \otimes (v - u) f \rangle + \langle v f \rangle \otimes u + u \otimes \langle v f \rangle - u \otimes u \langle f \rangle \\ &= \Sigma(f) + \rho u \otimes u + u \otimes \rho u - u \otimes u \rho \\ &= \Sigma(f) + \rho u \otimes u.\end{aligned}$$

Pour le flux d'énergie, on trouve

$$\begin{aligned}\langle \tfrac{1}{2} v |v|^2 f \rangle &= \langle \tfrac{1}{2} (v - u) |v|^2 f \rangle + \langle \tfrac{1}{2} |v|^2 f \rangle u \\ &= \langle \tfrac{1}{2} (v - u) |v - u|^2 f \rangle + \langle \tfrac{1}{2} (v - u) f \rangle |u|^2 + \langle (v - u) ((v - u) \cdot u) f \rangle + Eu \\ &= q(f) + 0 + \Sigma(f)u + Eu.\end{aligned}$$

Pour une justification des termes utilisés pour nommer $\Sigma(f)$ et $q(f)$, voir la section 4. \square

Cette décomposition nous permet de donner une autre écriture de ces lois de conservation.

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla \cdot \rho u &= 0, \\ \partial_t \rho u + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla \cdot \Sigma(f) &= 0, \\ \partial_t E + \nabla \cdot (Eu + \Sigma(f)u + q(f)) &= 0.\end{aligned} \quad (9.7)$$

Noter la forte ressemblance entre ces équations et les équations de Navier-Stokes compressibles utilisées pour décrire un gaz au niveau macroscopique (voir (1.2)). Attention cependant, ces lois de conservation locales ne constituent pas un système fermé : en effet, $\Sigma(f)$ et $q(f)$ ne sont a priori pas fonction de ρ , u , et E , mais de la distribution f toute entière.

9.4 Théorème H et convergence vers l'équilibre

Décroissance d'entropie

L'hypothèse 9.2 est aussi appelée propriété de décroissance d'entropie. Pour le comprendre, considérons à nouveau un gaz homogène en espace (c.-à-d. tel que f ne dépende pas de x). L'équation de Boltzmann s'écrit donc

$$\partial_t f = Q(f). \quad (9.8)$$

La fonction H de Boltzmann est la quantité suivante :

$$H(f) = \langle f \ln f \rangle.$$

Elle est souvent appelée *entropie cinétique* dans la littérature récente.

Il est facile d'obtenir une équation d'évolution pour cette quantité : remarquons que la dérivée de la fonction $r \ln r$ vaut $1 + \ln r$, de sorte qu'en multipliant l'équation de Boltzmann par $1 + \ln f$, puis en intégrant en vitesse, on trouve

$$\begin{aligned} \partial_t H(f) &= \langle (1 + \ln f) \partial_t f \rangle \\ &= \langle Q(f)(1 + \ln f) \rangle = \langle Q(f) \ln f \rangle \quad \text{d'après (9.2),} \\ &\leq 0, \end{aligned} \tag{9.9}$$

d'après (9.3). Ainsi, l'entropie $H(f)$ est décroissante au cours du temps.

Convergence vers l'équilibre.

Une conséquence de cette propriété d'entropie est la convergence vers l'équilibre. Commençons par démontrer que $H(f)$ tend vers une limite finie : il suffit pour cela de prouver qu'elle est minorée par une constante, et la monotonie de $H(f)$ impliquera sa limite. Tout d'abord, les propriétés de conservation énoncées plus haut montrent que la maxwellienne locale de f est constante au cours du temps (puisque ρ, u , et T sont constants). Ensuite, on va appliquer l'inégalité de convexité

$$\phi'(a)(b - a) \leq \phi(b) - \phi(a)$$

valable pour toute fonction convexe dérivable ϕ et tous réels a, b (voir figure 9.1) à la fonction $\phi(r) = r \ln r$ (avec $a = M[\rho, u, T]$ et $b = f$) pour obtenir la minoration suivante :

$$\langle (1 + \ln M[\rho, u, T])(f - M[\rho, u, T]) \rangle \leq H(f) - H(M[\rho, u, T]). \tag{9.10}$$

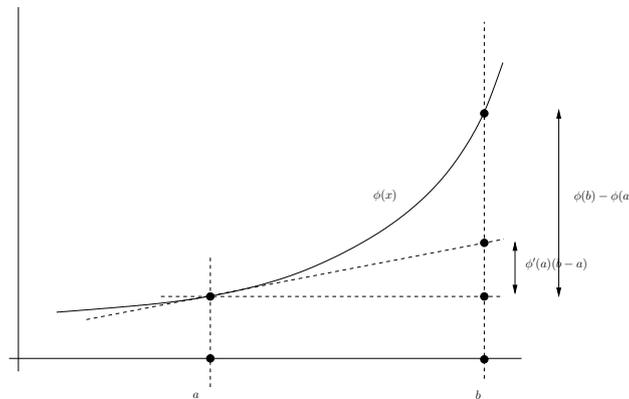


FIGURE 9.1 – inégalité de convexité $\phi'(a)(b - a) \leq \phi(b) - \phi(a)$ pour la fonction convexe et dérivable ϕ

Or un simple calcul montre que $(1 + \ln M[\rho, u, T])$ est une combinaison linéaire de 1, v et $|v|^2$. Comme f et $M[\rho, u, T]$ ont les mêmes moments, alors le terme de gauche de l'inégalité est nul : plus précisément, on a

$$\begin{aligned} & \langle (1 + \ln M[\rho, u, T])(f - M[\rho, u, T]) \rangle \\ &= \langle (a + b \cdot v + c|v|^2)(f - M[\rho, u, T]) \rangle \\ &= a \langle f - M[\rho, u, T] \rangle + b \cdot \langle v(f - M[\rho, u, T]) \rangle + c \langle |v|^2(f - M[\rho, u, T]) \rangle \\ &= 0. \end{aligned} \tag{9.11}$$

Par conséquent, on a $H(f)(t) \geq H(M[\rho, u, T])$ pour tout t , et donc $H(f)(t)$ tend vers une limite finie quand t tend vers l'infini.

Cela implique que $\partial_t H$ tend vers 0, et donc (9.9) implique que $\langle Q(f) \ln f \rangle$ tend aussi vers 0. Supposons qu'il existe f_∞ telle que f tende vers f_∞ quand t tend vers l'infini (c.-à.d. que le gaz tend vers un état stationnaire), alors cette distribution limite vérifie $\langle Q(f_\infty) \ln f_\infty \rangle = 0$.

Il reste alors à utiliser l'hypothèse 9.3 : cette hypothèse implique que la distribution limite est donc une distribution maxwellienne. Cette distribution a les mêmes moments que f_∞ , qui elle-même a les mêmes moments que $f(0)$ (rappelons que ces moments sont constants). Donc cette maxwellienne limite est la maxwellienne initiale. En résumé, un gaz spatialement homogène est de densité de masse, de vitesse macroscopique, et de température constante, et il tend vers un état dit d'équilibre, représenté par une distribution maxwellienne.

Contrairement à ce que ces arguments formels pourraient laisser penser, la théorie mathématique rigoureuse de la convergence vers l'équilibre est extrêmement complexe, et elle a fait l'objet de nombreux travaux depuis les années 2000.

9.5 Modèle BGK

L'opérateur de collision de Boltzmann est très complexe : d'un point de vue numérique, pour chaque vitesse, il faut calculer une intégrale sur $\mathbb{R}^3 \times S^2$, ce qui peut être très coûteux. Pour faire des calculs analytiques, cette complexité pose aussi de sérieux problèmes. Plusieurs auteurs ont donc proposé une simplification de l'opérateur, en retenant deux propriétés essentielles :

- la conservation ;
- la dissipation d'entropie et la convergence vers les maxwelliennes.

L'idée de convergence vers un équilibre suggère naturellement de considérer un opérateur de relaxation. En effet, il est connu que les solutions de l'équation différentielle ordinaire $y'(t) = \frac{1}{\tau}(a - y(t))$ convergent vers la solution stationnaire $y_\infty = a$: il suffit pour cela de calculer ces solutions qui s'écrivent $y(t) = y_0(t)e^{-t/\tau} + (1 - e^{-t/\tau})a$. Ainsi, on obtiendra une relaxation de f vers une maxwellienne M en utilisant l'opérateur $Q(f) = \frac{1}{\tau}(M - f)$. La propriété de conservation $\langle Q(f) = 0 \rangle$ implique $\langle (1, v, \frac{1}{2}|v|^2)f \rangle = \langle (1, v, \frac{1}{2}|v|^2)M \rangle$ pour tout temps. Ainsi, les moments de M sont égaux à ceux de f , et donc la maxwellienne M n'est autre que la maxwellienne locale de f , c'est-à-dire $M[\rho, u, T]$, où ρ , u , et T sont les variables macroscopiques de f définies par (2.1)–(2.6).

On obtient ainsi l'opérateur de relaxation proposé par Bathnagar, Gross et Krook (et

indépendamment par Welander), et appelé opérateur BGK, qui s'écrit

$$Q_{BGK}(f) = \frac{1}{\tau}(M[\rho, u, T] - f), \quad (9.12)$$

et le modèle BGK complet s'écrit

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\tau}(M[\rho, u, T] - f). \quad (9.13)$$

Ce modèle est beaucoup plus simple à traiter numériquement (et simplifie aussi de nombreux calculs analytiques, comme nous le verrons plus tard). Il permet de modéliser le gaz raréfié avec une bonne précision dans beaucoup de situations, notamment quand le gaz est proche de l'équilibre, et il est très utilisé en pratique.

Par construction, l'opérateur Q_{BGK} satisfait nécessairement les propriétés de conservation (9.2). Pour la propriété de dissipation d'entropie (9.3), on peut à nouveau utiliser l'inégalité de convexité (9.10) en intervertissant le rôle de f et $M[\rho, u, T]$ pour trouver

$$\begin{aligned} \langle (1 + \ln f)(M[\rho, u, T] - f) \rangle &\leq H(M[\rho, u, T]) - H(f) \\ &\leq 0, \end{aligned}$$

d'après la propriété de minimisation d'entropie donnée à la fin de la section 5. En utilisant la propriété de conservation, on a $\langle (1 + \ln f)(M[\rho, u, T] - f) \rangle = \langle \ln f(M[\rho, u, T] - f) \rangle$, et donc on obtient la propriété de dissipation d'entropie $\langle Q_{BGK}(f) \ln f \rangle \leq 0$.

Il reste à définir le taux de relaxation τ , ce qui sera fait dans le chapitre 10.

Chapitre 10

Analyse asymptotique

10.1 Analyse dimensionnelle

Dans un modèle physique donné, les variables et les inconnues peuvent prendre des valeurs numériques d'ordre de grandeur très différent : par exemple, pour un problème de rentrée atmosphérique, les variations temporelles peuvent se faire sur une durée typique de l'ordre de 10^{-3} seconde, la valeur moyenne de la fonction de distribution peut être de l'ordre de 10^{-5} , la température est de l'ordre de 100 K, la vitesse moyenne est de l'ordre de 1000 m.s⁻¹, etc. L'analyse dimensionnelle du modèle physique consiste à transformer les variables et les inconnues (par une homothétie) de façon à que leurs valeurs moyennes soient toutes de l'ordre de 1. Cela permet de comparer l'ordre de grandeur des différents termes du modèle entre eux, de faire apparaître différentes échelles spatiales ou temporelles, et de mettre en évidence différents types de comportements possibles de la solution selon les données, en utilisant pour cela les nombres sans dimension apparaissant dans le modèle. Un exemple bien connu en mécanique des fluides est l'analyse dimensionnelle des équations de Navier-Stokes compressibles qui fait apparaître les nombres de Mach et de Reynolds : cela permet d'identifier différents régimes comme le régime incompressible linéaire ou non linéaire, le régime non visqueux, etc.

Dans cette section, nous procédons de cette façon sur le modèle BGK de la dynamique des gaz raréfiés. Il est possible de faire la même analyse sur l'équation de Boltzmann, mais cela est inutilement compliqué pour le but que l'on se fixe dans ce cours. Considérons que sur un problème donné, nous sommes capables d'identifier des grandeurs "caractéristiques" (on dit aussi "de référence") de longueur L , de pression p_* , et de température T_* . Cela signifie que l'on s'intéresse de façon privilégiée aux variations de la solution sur une longueur de l'ordre de L , et que la pression et la température vont varier autour des valeurs p_* et T_* . La longueur de référence peut être celle du domaine de calcul, ou la longueur de l'obstacle autour duquel s'écoule le gaz. La pression et température de référence peuvent être celles de l'écoulement non perturbé loin de l'obstacle.

Avec ces grandeurs de références, nous allons définir les grandeurs de référence des autres variables ou inconnues du problème : la densité $\rho_* = p_*/RT_*$, la vitesse $v_* = \sqrt{RT_*}$ (la vitesse thermique), le temps $t_* = L/v_*$ (c'est le temps mis par une particule animée d'une vitesse égale à la vitesse thermique pour parcourir la distance de référence L), la fonction de

distribution $f_* = \rho_*/(RT_*)^{3/2}$ (il s'agit d'une constante).

Enfin, nous utiliserons un autre temps de référence en se donnant τ_* qui est une valeur typique du temps de relaxation τ . Cette valeur est donc représentative du temps moyen entre deux collisions.

À présent, nous définissons les variables et inconnues *adimensionnées* : la position $x' = x/L$, le temps $t' = t/t_*$, la vitesse $v' = v/v_*$, la densité $\rho' = \rho/\rho_*$, la pression $p' = p/p_*$, la température $T' = T/T_*$, le temps de relaxation $\tau' = \tau/\tau_*$, la distribution $f' = f/f_*$. Nous pouvons maintenant passer à l'écriture de l'équation BGK (9.13) avec ces nouvelles variables pour la fonction $f'(t', x', v') = f(t, x, v)/f_*$. Calculons les différents termes de cette équation :

$$\begin{aligned} \partial_t f(t, x, v) &= \partial_{t'} f_* f'(t', x', v') \frac{1}{t_*} \\ v \cdot \nabla_x f(t, x, v) &= v_* v' \nabla_{x'} f_* f'(t', x', v') \frac{1}{L} \\ M[\rho(t, x), u(t, x), T(t, x)](v) &= \frac{\rho(t, x)}{(2\pi RT(t, x))^{3/2}} \exp\left(-\frac{|v - u(t, x)|^2}{2RT(t, x)}\right) \\ &= \frac{\rho_* \rho'(t', x')}{(2\pi RT_* T'(t', x'))^{3/2}} \exp\left(-\frac{|v_* v' - v_* u'(t', x')|^2}{2RT_* T'(t', x')}\right) \\ &= \frac{\rho_*}{(RT_*)^{3/2}} \frac{\rho'(t', x')}{(2\pi T'(t', x'))^{3/2}} \exp\left(-\frac{|v' - u'(t', x')|^2}{2T'(t', x')}\right) \\ &= f_* M'[\rho'(t', x'), u(t', x'), T'(t', x')](v'), \end{aligned}$$

où l'on a utilisé les liens entre v_* et T_* , et où l'on note M' la maxwellienne adimensionnée, obtenue par (2.7) avec $R = 1$. L'équation BGK (9.13) s'écrit donc

$$\frac{f_*}{t_*} \partial_{t'} f' + \frac{v_* f_*}{L} v' \nabla_{x'} f' = \frac{f_*}{\tau_* \tau'} (M'[\rho', u', T'] - f'),$$

En divisant tous les termes par $\frac{f_*}{t_*}$ et en utilisant $t_* = L/v_*$, on trouve

$$\partial_{t'} f' + v' \nabla_{x'} f' = \frac{t_*}{\tau_*} \frac{1}{\tau'} (M'[\rho', u', T'] - f'). \quad (10.1)$$

À présent, définissons le *libre parcours moyen* λ comme la distance parcourue par une particule animée de la vitesse caractéristique v_* pendant le temps de relaxation de référence τ_* , soit :

$$\lambda = v_* \tau_*. \quad (10.2)$$

Nous pouvons alors réécrire le rapport t_*/τ apparaissant dans (10.1) comme

$$\frac{t_*}{\tau_*} = \frac{v_* t_*}{v_* \tau_*} = \frac{L}{\lambda},$$

d'après la définition de t_* . Ce rapport fait apparaître l'inverse du *nombre de Knudsen* défini par

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L}, \quad (10.3)$$

qui est un nombre sans dimension mesurant le rapport entre une distance typique microscopique (le libre parcours moyen λ) et une distance typique macroscopique (la distance L). Nous avons déjà rencontré ce nombre à la section 2.4 : c'est lui qui permet la classification des régimes d'écoulements en régime raréfié ou régime dense.

Pour la suite de ce chapitre, nous travaillerons la plupart du temps sur l'équation adimensionnée (10.1), et pour alléger les notations, nous supprimerons les primes ' sur toutes les variables. En outre, pour suivre une notation habituelle en analyse asymptotique, nous noterons le nombre de Knudsen ε au lieu de Kn . Enfin, nous nous placerons dans le cas d'un gaz en dimension d quelconque (qui était 3 jusqu'ici), ce qui a l'avantage de faire apparaître plus clairement dans les calculs le rôle de la dimension. L'équation considérée s'écrit donc maintenant :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon \tau} (M[\rho, u, T] - f), \quad (10.4)$$

où la maxwellienne adimensionnée, les moments, et la température, sont définies par

$$M[\rho, u, T] = \frac{\rho}{(2\pi T)^{d/2}} \exp\left(-\frac{|v-u|^2}{2T}\right), \quad (10.5)$$

$$(\rho, \rho u, E) = \langle (1, v, \frac{1}{2}|v|^2) f \, dv \rangle, \quad (10.6)$$

$$E = \frac{1}{2} \rho |u|^2 + \frac{d}{2} \rho T. \quad (10.7)$$

10.2 De Boltzmann à Euler

Dans cette section, nous montrons que quand ε est petit, f est proche de sa maxwellienne locale à $O(\varepsilon)$ près et que ses moments satisfont les équations d'Euler à $O(\varepsilon)$ près.

Tout d'abord, observons que l'équation (10.4) implique

$$f = M[\rho, u, T] + \varepsilon \tau (\partial_t f + v \cdot \nabla_x f). \quad (10.8)$$

Si l'on suppose que f et ses dérivées par rapport à t et à x sont d'ordre 1 par rapport à ε (ce qui n'a rien d'évident¹), alors (10.8) implique

$$f = M[\rho, u, T] + O(\varepsilon). \quad (10.9)$$

Ensuite, rappelons les lois de conservation (9.7) que vérifient les moments de f :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \nabla_x \cdot \rho u &= 0, \\ \partial_t \rho u + \nabla_x \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla_x \cdot \Sigma(f) &= 0, \\ \partial_t E + \nabla_x \cdot (Eu + \Sigma(f)u + q(f)) &= 0. \end{aligned} \quad (10.10)$$

1. cela n'est pas vrai quand la distribution initiale ou les données aux bords sont non maxwelliennes : dans ce cas, l'analyse de cette section doit être modifiée pour tenir compte du phénomène de *couche initiale* et *couche limite*.

La relation (10.9) permet d'approcher le tenseur des contraintes et le flux de chaleur à $O(\varepsilon)$ près pour obtenir :

$$\begin{aligned}\Sigma(f) &= \Sigma(M[\rho, u, T] + O(\varepsilon)) = \Sigma(M[\rho, u, T]) + O(\varepsilon), \\ q(f) &= q(M[\rho, u, T] + O(\varepsilon)) = q(M[\rho, u, T]) + O(\varepsilon).\end{aligned}$$

On utilise ensuite les expressions (5.1) et (5.2) du tenseur des contraintes et du flux de chaleur de la maxwellienne pour obtenir

$$\Sigma(f) = pI_d + O(\varepsilon), \quad (10.11)$$

$$q(f) = O(\varepsilon), \quad (10.12)$$

en notant bien qu'ici, l'utilisation des variables adimensionnées implique $p = \rho T$ (la constante R n'apparaît plus). Enfin, nous revenons aux lois de conservation (10.10) qui s'écrivent maintenant

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla_x \cdot \rho u &= 0, \\ \partial_t \rho u + \nabla_x \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla_x p &= O(\varepsilon), \\ \partial_t E + \nabla_x \cdot ((E + p)u) &= O(\varepsilon).\end{aligned} \quad (10.13)$$

Nous voyons donc que ρ , ρu , et E satisfont les équations d'Euler de la dynamique des gaz compressibles (1.1) à $O(\varepsilon)$ près.

Pour la suite, il est utile de réécrire ces équations sous forme non conservative, c'est-à-dire avec les inconnues ρ , u , et T . Un calcul simple, mais un peu long, nous donne

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \nabla_x \cdot u &= 0, \\ \partial_t u + (u \cdot \nabla_x)u + \frac{1}{\rho} \nabla_x p &= O(\varepsilon), \\ \partial_t T + u \cdot \nabla_x T + \frac{2}{d} T \nabla_x \cdot u &= O(\varepsilon).\end{aligned} \quad (10.14)$$

Notons que l'analyse formelle qui précède nous montre que quand ε tend vers 0, f tend vers sa maxwellienne locale, et les lois de conservation tendent vers les équations d'Euler. Ces équations d'Euler peuvent donc être vues comme la limite de l'équation de Boltzmann quand le nombre de Knudsen tend vers 0.

Pour terminer, il est important de revenir aux variables dimensionnelles. En effet, le modèle asymptotique (10.13) a été obtenu en variables adimensionnées : si on veut le comparer aux équations d'Euler de la dynamique des gaz, qui sont généralement écrites en variables dimensionnées, il convient de le réécrire avec les bonnes variables. Ceci ne présente aucune difficulté : rappelons que (10.13) doit en fait être écrit avec des ' sur toutes les variables, puis effectuons le changement de variables et d'inconnues utilisé dans la section précédente, dans l'autre sens. Il est facile de voir que le système obtenu est toujours (10.13), à la différence que E et p font maintenant intervenir la constante du gaz R : on retrouve $\frac{1}{2}\rho|u|^2 + \frac{d}{2}\rho RT$ et $p = \rho RT$.

10.3 De Boltzmann à Navier-Stokes

La section 10.2 nous a montré que les moments de f satisfont les équations d'Euler à $O(\varepsilon)$ près. Il est légitime de se demander s'il n'existe pas un autre système d'équations qui serait lui satisfait à $O(\varepsilon^2)$ près : on aurait ainsi un modèle macroscopique qui permettrait de décrire le gaz sans passer par l'équation de Boltzmann, mais qui serait plus précis que les équations d'Euler. La réponse à cette question est un des plus grands mérites de la théorie cinétique : ce système d'équation existe bien, et il n'est autre que le système des équations de Navier-Stokes (1.2).

La méthode permettant d'arriver à ce résultat est appelée développement de *Chapman-Enskog*. On peut aussi y arriver par le développement de Hilbert, mais cela est plus compliqué. Dans le cas du modèle BGK que nous considérons ici, le développement de Chapman-Enskog n'est pas bien compliqué, mais nécessite de longs calculs².

Remarquons que ce qui nous a permis d'obtenir les équations d'Euler à $O(\varepsilon)$ près est la relation $f = M[\rho, u, T] + O(\varepsilon)$. Pour obtenir un système d'équations satisfait à un ordre supérieur, il nous faut examiner le reste $O(\varepsilon)$ dans la relation précédente. Notons alors $\varepsilon g = f - M[\rho, u, T]$ la différence entre f et sa maxwellienne locale (appelée aussi *déviaton* par rapport à l'équilibre), ce qui s'écrit aussi :

$$f = M[\rho, u, T] + \varepsilon g. \quad (10.15)$$

À présent, nous utilisons cette décomposition pour écrire de façon plus précise le tenseur des contraintes et le flux de chaleur de f :

$$\begin{aligned} \Sigma(f) &= \Sigma(M[\rho, u, T] + \varepsilon g) = \Sigma(M[\rho, u, T]) + \varepsilon \Sigma(g), \\ q(f) &= q(M[\rho, u, T] + \varepsilon g) = q(M[\rho, u, T]) + \varepsilon q(g), \end{aligned}$$

et utilisant nouveau les expressions de $\Sigma(M)$ et $q(M)$, nous trouvons

$$\Sigma(f) = pI_d + \varepsilon \Sigma(g), \quad (10.16)$$

$$q(f) = \varepsilon q(g). \quad (10.17)$$

Il nous faut donc maintenant approcher $\Sigma(g)$ et $q(g)$ à $O(\varepsilon)$ près au moins. Pour cela, revenons à l'équation (10.4) que nous écrivons en utilisant la décomposition (10.15). Il vient :

$$g = -\tau(\partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T]) - \varepsilon(\partial_t g + v \cdot \nabla_x g).$$

Comme $g = O(1)$ (la section 10.2 nous a montré que $f - M[\rho, u, T] = O(\varepsilon)$, or $g = (f - M[\rho, u, T])/\varepsilon$) nous voyons que le second terme de l'expression ci-dessus est en fait un $O(\varepsilon)$, ce qui donne

$$g = -\tau(\partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T]) + O(\varepsilon). \quad (10.18)$$

Nous avons donc une expression de g en fonction des variables macroscopiques et de leurs dérivées à $O(\varepsilon)$ près. Nous voyons déjà que cela va nous permettre d'exprimer le tenseur des contraintes et le flux de chaleur en fonction des variables macroscopiques et de leurs dérivées,

2. Afin de ne pas rendre cette présentation trop indigeste, les calculs les plus compliqués, qui ne sont d'aucun intérêt pour la compréhension de la méthode, sont en général placés en appendice.

à $O(\varepsilon^2)$ près, et donc d'obtenir le système d'équations souhaité. Pour cela, il va cependant falloir encore procéder à de longs calculs.

Il nous faut tout d'abord calculer le tenseur des contraintes et le flux de chaleur de g en utilisant la relation (10.18). Nous avons

$$\Sigma(g) = -\tau \langle (v - u) \otimes (v - u) (\partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T]) \rangle + O(\varepsilon), \quad (10.19)$$

$$q(g) = -\tau \langle \frac{1}{2} (v - u) |v - u|^2 (\partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T]) \rangle + O(\varepsilon). \quad (10.20)$$

Ensuite, nous calculons le résultat de l'opérateur de transport appliqué à $M[\rho, u, T]$. Un calcul simple (voir appendice A.3) donne

$$\begin{aligned} & \partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T] \\ &= \left(\frac{\partial_t \rho + v \cdot \nabla_x \rho}{\rho} + \frac{(v - u) \cdot (\partial_t u + (\nabla_x u) v)}{T} + \frac{(\frac{|v-u|^2}{2T} - \frac{d}{2})(\partial_t T + v \cdot \nabla_x T)}{T} \right) M[\rho, u, T]. \end{aligned} \quad (10.21)$$

Il est possible d'injecter cette relation dans (10.19) et (10.20), et de calculer les intégrales correspondantes, mais on obtient alors $\Sigma(g)$ et $q(g)$ en fonction des dérivées spatiales et temporelles des quantités macroscopiques. Cette dépendance par rapport aux dérivées temporelles donne un système qu'il est difficile de relier aux équations de Navier-Stokes. En fait, on peut éliminer ces dérivées temporelles à l'aide de l'astuce suivante : sachant que ρ , u , et T vérifient les équations d'Euler non conservatives à $O(\varepsilon)$ près (voir (10.14)), on peut exprimer les dérivées temporelles en fonction des dérivées spatiales à $O(\varepsilon)$ près :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho &= -u \cdot \nabla_x \rho - \rho \nabla_x \cdot u, \\ \partial_t u &= -(\nabla_x u) u - \frac{1}{\rho} \nabla_x p + O(\varepsilon), \\ \partial_t T &= -u \cdot \nabla_x T - \frac{2}{d} T \nabla_x \cdot u + O(\varepsilon). \end{aligned}$$

On utilise alors ces relations dans (10.21) pour trouver

$$\begin{aligned} & \partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T] \\ &= M[\rho, u, T] \left[\frac{1}{\rho} \left((v - u) \cdot \nabla \rho - \rho \nabla \cdot u \right) \right. \\ & \quad + \frac{1}{T} (v - u) \cdot \left((\nabla_x u) (v - u) - \frac{1}{\rho} \nabla_x p \right) \\ & \quad \left. + \frac{1}{T} \left(\frac{|v - u|^2}{2T} - \frac{d}{2} \right) \left((v - u) \cdot \nabla_x T - \frac{2}{d} T \nabla \cdot u \right) + O(\varepsilon) \right]. \end{aligned}$$

On utilise ensuite la relation $\nabla_x p = \nabla_x \rho T = T \nabla \rho + \rho \nabla_x T$ pour simplifier l'expression

précédente :

$$\begin{aligned}
& \partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T] \\
&= M[\rho, u, T] \left[-\frac{|v-u|^2}{dT} \nabla_x \cdot u + \frac{1}{T} (v-u) \otimes (v-u) : \nabla_x u \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{|v-u|^2}{2T} - \frac{d+2}{2} \right) \left(\frac{(v-u)}{T} \cdot \nabla_x T \right) \right] + O(\varepsilon) \\
&= M[\rho, u, T] \left[\left(\frac{(v-u) \otimes (v-u)}{T} - \frac{|v-u|^2}{dT} I_d \right) : \nabla_x u \right. \\
&\quad \left. + \left(\frac{|v-u|^2}{2T} - \frac{d+2}{2} \right) \left((v-u) \cdot \frac{\nabla_x T}{T} \right) \right] + O(\varepsilon),
\end{aligned}$$

où l'on a utilisé la relation (facile à vérifier) $\nabla_x \cdot u = I_d : \nabla_x u$ pour factoriser les termes en u . On introduit enfin les notations suivantes :

$$V = \frac{v-u}{\sqrt{T}}, \quad A(V) = \left(\frac{1}{2}|V|^2 - \frac{d+2}{2} \right) V, \quad B(V) = V \otimes V - \frac{1}{d}|V|^2 I_d \quad (10.22)$$

pour trouver l'expression très compacte

$$\begin{aligned}
& \partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T] \\
&= \left(A(V) \cdot \frac{\nabla_x T}{\sqrt{T}} + B(V) : \nabla_x u \right) M[\rho, u, T] + O(\varepsilon).
\end{aligned}$$

On peut encore simplifier les calculs à venir en exprimant $M[\rho, u, T]$ en fonction de V : on a en effet

$$M[\rho, u, T](v) = \frac{\rho}{T^{\frac{d}{2}}} M_0(V), \quad \text{où} \quad M_0(V) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \exp\left(-\frac{|V|^2}{2}\right). \quad (10.23)$$

Effectuons aussi le changement de variable $v \mapsto V$ dans toute intégrale du type suivant :

$$\int \phi(V) M[\rho, u, T](v) dv = \rho \int \phi(V) M_0(V) dV.$$

Nous noterons dans la suite de la même façon $\langle \cdot \rangle$ pour toute intégrale par rapport à v ou à V : les variables utilisées dans les expressions indiquerons sans ambiguïté la variable d'intégration.

Nous pouvons à présent revenir aux expressions du tenseur des contraintes (10.19) et du flux de chaleur (10.20). Les calculs précédents donnent :

$$\begin{aligned}
\Sigma(g) &= -\tau \rho T \langle V \otimes V \left(A(V) \cdot \frac{\nabla_x T}{\sqrt{T}} + B(V) : \nabla_x u \right) M_0(V) \rangle + O(\varepsilon), \\
q(g) &= -\tau \rho T^{\frac{3}{2}} \langle \frac{1}{2} V |V|^2 \left(A(V) \cdot \frac{\nabla_x T}{\sqrt{T}} + B(V) : \nabla_x u \right) M_0(V) \rangle + O(\varepsilon).
\end{aligned}$$

Remarquons enfin que les fonctions M_0 et B sont paires par rapport à V , alors que A est impaire. Ceci permet d'identifier des termes impairs, donc d'intégrales nulles, dans les expressions de $\Sigma(g)$ et $q(g)$ pour obtenir finalement :

$$\begin{aligned}\Sigma(g) &= -\tau\rho T \langle V \otimes V (B(V) : \nabla_x u) M_0(V) \rangle + O(\varepsilon), \\ q(g) &= -\tau\rho T \langle \frac{1}{2} V |V|^2 (A(V) \cdot \nabla_x T) M_0(V) \rangle + O(\varepsilon).\end{aligned}$$

Tout ce travail nous a permis d'écrire $\Sigma(g)$ et $q(g)$ comme combinaisons linéaires de différents moments de la gaussienne $M_0(V)$, à $O(\varepsilon)$ près. Nous renvoyons aux appendices A.2.3 et A.2.4 pour les calculs de ces moments, qui permettent d'aboutir au résultat suivant :

$$\Sigma(g) = -\tau\rho T \left(\nabla_x u + (\nabla_x u)^T - \frac{2}{d} \nabla_x \cdot u I_d \right) + O(\varepsilon), \quad (10.24)$$

$$q(g) = -\tau\rho T \frac{d+2}{2} \nabla_x T + O(\varepsilon). \quad (10.25)$$

En revenant aux décompositions (10.16)-(10.17), et en utilisant le résultat ci-dessus, on a alors un développement asymptotique du tenseur des contraintes et du flux de chaleur à $O(\varepsilon^2)$ près, en fonction des quantités macroscopiques et de leurs gradients. Ce développement s'écrit

$$\Sigma(f) = pI_d + \sigma + O(\varepsilon^2), \quad q(g) = q + O(\varepsilon^2), \quad (10.26)$$

avec

$$\begin{aligned}\sigma &= -\varepsilon\tau\rho T \left(\nabla_x u + (\nabla_x u)^T - \frac{2}{d} \nabla_x \cdot u I_d \right), \\ q &= -\varepsilon\tau\rho T \frac{d+2}{2} \nabla_x T.\end{aligned} \quad (10.27)$$

Revenons à présent aux lois de conservation (10.10) : en utilisant (10.26)–(10.27), on trouve

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla_x \cdot \rho u &= 0, \\ \partial_t \rho u + \nabla_x \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla_x p &= -\nabla \cdot \sigma + O(\varepsilon^2), \\ \partial_t E + \nabla_x \cdot (E + p)u &= -\nabla_x \cdot q - \nabla_x \cdot (\sigma u) + O(\varepsilon^2).\end{aligned} \quad (10.28)$$

On peut maintenant voir que ces relations sont tout simplement les équations de Navier-Stokes (1.2) aux termes $O(\varepsilon^2)$ près. Pour cela, il convient de revenir aux variables dimensionnelles : la seule conséquence de ce changement de variables inverse est que la température adimensionnée T est remplacée par RT dans toutes les expressions (y compris dans E et p). Ainsi, on trouve à nouveau (10.28), avec

$$\sigma = -\tau p (\nabla_x u + (\nabla_x u)^T - \frac{2}{d} \nabla_x \cdot u I_d) \quad \text{et} \quad q = -\tau p R \frac{d+2}{2} \nabla_x T, \quad (10.29)$$

En notant μ_{BGK} et κ_{BGK} les *coefficients de transports* définis par

$$\mu_{BGK} = \tau p \quad \text{et} \quad \kappa_{BGK} = \tau p R \frac{d+2}{2}, \quad (10.30)$$

et en négligeant les termes en $O(\varepsilon^2)$, on retrouve exactement (1.2) avec les lois de Newton et de Fourier (1.3), où les coefficients de viscosité et de transfert thermique sont donnés par $\mu = \mu_{BGK}$ et $\kappa = \kappa_{BGK}$ définis ci-dessus.

En résumé, nous avons donc montré que les quantités macroscopiques ρ , ρu , et E associées à la solution de l'équation BGK sont aussi solutions à ε^2 près des équations de Navier-Stokes de la dynamique des gaz compressibles. Le modèle de Navier-Stokes fournit donc une approximation plus précise de la solution de l'équation BGK que le modèle d'Euler vu précédemment.

Remarque 10.1. Notre analyse nous montre aussi que les coefficients de transport, en variables adimensionnées, sont du même ordre que le nombre de Knudsen (voir (10.27)).

Remarque 10.2. Un autre point important est que le développement de Chapman-Enskog permet de définir les coefficients de transports μ et κ en fonction des quantités macroscopiques. Cela est remarquable, puisque une telle relation n'est pas fournie par la mécanique des fluides, mais est plutôt obtenue comme une hypothèse validée par de nombreuses expériences. Encore plus important : on peut étendre le développement de Chapman-Enskog à l'équation de Boltzmann (ce qui induit de nombreux calculs plus complexes que ceux exposés ici), et l'on obtient un lien entre les coefficients de transports et le potentiel d'interaction moléculaire. Ce résultat est un des succès majeurs de la théorie cinétique des gaz.

Remarque 10.3. Le modèle BGK présente un défaut notable : il conduit à un *nombre de Prandtl* incorrect. Ce nombre est défini par

$$\text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\kappa}, \quad (10.31)$$

où $c_p = \frac{5}{2}R$ est la capacité thermique massique à pression constante pour un gaz monoatomique. Pour un tel gaz, la valeur de Pr calculée avec les mesures expérimentales de μ et κ donnent une valeur constante très proche de $2/3$, ce qui montre que μ et κ sont proportionnels. De façon remarquable, le nombre de Prandtl calculé avec les valeurs de μ et κ obtenues par développement de Chapman-Enskog de l'équation de Boltzmann donnent exactement $2/3$. Par contre, avec le modèle BGK, les valeurs de μ et κ obtenues dans (10.30) donnent (en prenant $d = 3$) :

$$\text{Pr} = \frac{\tau p 5/2R}{\tau p R 5/2} = 1$$

au lieu de $2/3$. Cela signifie que le transfert de chaleur est trop rapide par rapport au transfert de quantité de mouvement, ce qui peut se voir sur les résultats de simulation.

Remarque 10.4. Revenons enfin sur le temps de relaxation τ du modèle BGK. En pratique, pour utiliser ce modèle, il faut bien se donner une valeur pour ce terme. Or dans tout ce qui précède, il n'a jamais été défini. Pour ce faire, on utilise une fois encore le développement de Chapman-Enskog. Tout d'abord, on se donne une relation définissant la viscosité μ_{BGK} en fonction de la température, en général du type $\mu = AT^\omega$, ce qui est cohérent avec les expériences et avec la viscosité calculée par développement de Chapman-Enskog sur l'équation de Boltzmann. Ensuite, on définit τ en utilisant la première relation de (10.30), ce qui donne $\tau = \mu_{BGK}/p$. Cette définition a l'avantage de donner un modèle BGK consistant avec le modèle de Navier-Stokes, en ce qui concerne la viscosité. Comme on l'a vu lors de l'étude du nombre de Prandtl, le coefficient de transfert thermique ne peut avoir la bonne valeur.

Remarque 10.5. Le modèle BGK peut être vu comme un modèle à un paramètre (le temps de relaxation τ) qui peut être ajusté de façon à obtenir la bonne valeur de μ . Pour obtenir les bonnes valeurs de μ et κ , il faudrait rajouter un deuxième paramètre dans le modèle. Cela a été effectué par Holway (modèle ESBGK) et Shakhov (modèle S).

Chapitre 11

Simulation numérique d'un écoulement raréfié

11.1 Généralités

Il existe une grande variété de méthodes numériques pour simuler un écoulement de gaz raréfié. Toutes sont basées sur l'équation de Boltzmann (9.1), et on peut les classer en deux grandes familles : les méthodes particulières et les méthodes déterministes.

Les méthodes particulières.

Ces méthodes sont intrinsèquement lagrangiennes, puisque le gaz y est décrit par des particules. Si les molécules sont trop nombreuses pour être décrites individuellement, celles-ci sont représentées collectivement par des particules dites « numériques » (de sorte que chaque particule représente entre une et quelques milliers de molécules). Les méthodes particulières supposent alors que le gaz peut-être efficacement simulé en faisant évoluer ces particules selon les lois de la théorie cinétique : transport et collisions.

À l'initialisation, on se donne un certain nombre de particules numériques, ainsi qu'un maillage du domaine de calcul. Chaque particule a une position et une vitesse initiale donnée, tirée aléatoirement selon une distribution représentative de l'écoulement initial (par exemple une maxwellienne). Ces particules sont dans une première étape déplacées en ligne droite selon leur vitesse propre, pendant un pas de temps Δt qui est suffisamment petit pour que les molécules se déplacent sur une distance inférieure au libre parcours moyen. Dans une deuxième étape, dans chaque maille, on fait évoluer les vitesses des particules présentes dans la maille en tenant compte des collisions binaires que celles-ci vont subir pendant un autre pas de temps Δt . Ce processus de collision est effectué de manière aléatoire, en utilisant le processus décrit par l'équation de Boltzmann. Les deux étapes sont alors itérées un grand nombre de fois, jusqu'à atteindre un état stationnaire.

Ces méthodes sont donc à la fois particulières, et probabilistes. Après stationnarisation, elles nécessitent un processus de moyennisation en temps pour éliminer le bruit stochastique inhérent à la méthode. Enfin, les quantités macroscopiques sont calculées dans chaque maille en sommant les grandeurs correspondantes des particules de la maille.

Il y a plusieurs avantages à ces méthodes : elles sont relativement simples à construire,

faciles à programmer et à paralléliser (si le maillage est cartésien), et leur coût de calcul est assez insensible à la complexité du gaz considéré (on peut ainsi simuler des gaz polyatomiques multi-espèces, avec réactions chimiques). Elles sont ainsi très utilisées en technologie des pompes à vide, méthode *Test Particle Monte Carlo* (TPMPC) [4], et en aérodynamique avec la célèbre méthode *Direct Simulation Monte Carlo* (DSMC) [1, 3].

Ces méthodes ont aussi des inconvénients. Lorsque le régime est trop dense, on ne peut augmenter indéfiniment le nombre de molécules représentées par une particule. Il faut donc augmenter le nombre de particules, qui peut devenir extrêmement grand. En outre, dans ce régime, les collisions sont très fréquentes, et le pas de temps doit donc être considérablement réduit. Dans un tel régime, le coût de calcul devient vite prohibitif. À l'heure actuelle, la méthode DSMC ne peut guère être utilisée pour des écoulements à nombre de Knudsen inférieur à 0.001.

Un autre inconvénient est celui des zones à faible densité : dans la zone arrière d'un véhicule spatial en rentrée dans l'atmosphère, la densité est très basse, et il se peut que le nombre de particules numériques dans cette zone soit trop faible pour permettre un résultat représentatif.

Enfin, les écoulements lents comme les micro-écoulements posent un autre problème : dans ce cas, la vitesse moyenne est très faible par rapport à la vitesse d'agitation thermique. Cela va induire un bruit statistique très important dans les résultats qui peut être difficile à réduire. En outre, la convergence vers l'état stationnaire devient très lente.

Ces méthodes ne seront pas décrites ici, nous renvoyons pour plus de détail au livre [1] de G. Bird, créateur de la méthode DSMC, la plus populaire à l'heure actuelle.

Les méthodes déterministes.

Les méthodes déterministes sont basées sur une discrétisation de l'équation de Boltzmann (9.1), au moyen de techniques classiques (différences finies, volumes finies, etc.). Elles consistent donc à calculer une approximation de la fonction de distribution.

L'avantage de ces méthodes est qu'elles ne génèrent pas de bruit statistique, et qu'elles peuvent être très précises (en utilisant des schémas numériques d'ordre élevé). Elles peuvent être assez rapides pour calculer un écoulement stationnaire (avec des méthodes implicites). L'inconvénient essentiel est qu'elles peuvent avoir un coût de calcul assez élevé, essentiellement en terme de mémoire, surtout pour les écoulements hypersoniques.

Nous renvoyons aux revues récentes [9, 5] qui donnent un aperçu assez complet des méthodes déterministes. Dans la suite, nous donnerons un exemple très simple d'une telle méthode, qui sera utilisée en TP (voir section 13).

11.2 Une méthode différences finies en 1D

11.2.1 Le modèle

Afin de décrire le plus simplement possible le principe de la méthode, nous considérons ici une équation simplifiée. Il s'agit d'une équation de type BGK qui décrit l'évolution d'un gaz fictif dans lequel les molécules ne peuvent se déplacer que dans une seule direction. Le

modèle est alors, sous une forme adimensionnée :

$$\partial_t f + v \partial_x f = \frac{1}{\varepsilon \tau} (M[\rho, u, T] - f), \quad (11.1)$$

où la position x et la vitesse v sont des scalaires, et où les quantités macroscopiques sont définies par

$$\rho = \int_{\mathbb{R}} f \, dv, \quad \rho u = \int_{\mathbb{R}} v f \, dv, \quad E = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} |v|^2 f \, dv,$$

et où la température et la pression sont définies par

$$E = \frac{1}{2} \rho |u|^2 + \frac{1}{2} \rho T \quad \text{et} \quad p = \rho T.$$

La distribution maxwellienne est ici donnée par

$$M[\rho, u, T](v) = \frac{\rho}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{|v - u|^2}{2T}\right),$$

et le temps de relaxation vaut $\tau = \mu(T)/p$, où $\mu(T)$ est la viscosité à la température T , strictement positive, et supposée connue.

Nous complétons ce modèle par des conditions aux limites : considérons le domaine spatial borné $[-1, 1]$, et supposons connues f_G et f_D qui sont les deux distributions des molécules rentrant par les bords du domaine, de sorte que l'on impose

$$f(t, x = -1, v > 0) = f_G \quad \text{et} \quad f(t, x = 1, v < 0) = f_D. \quad (11.2)$$

Les distributions f_G et f_D peuvent dépendre des distribution incidentes si l'on a une paroi en $x = -1$ ou $x = 1$, ou être des données dans le cas d'une condition d'entrée. On pourrait aussi imposer une condition de sortie, par exemple à droite, en imposant $\partial_x f(t, x = 1, v) = 0$. Enfin, nous supposons connue la donnée initiale $f(t = 0, x, v) = f_{init}(x, v)$ dans tout le domaine $[-1, 1]$ et pour tout v .

Il faut maintenant discrétiser le système constitué de l'équation BGK (11.1) et des conditions aux limites (11.2). Nous procédons en deux temps : nous commençons d'abord par détailler la façon dont on peut discrétiser la variable de vitesse, puis nous présentons la discrétisation en espace et en temps.

11.2.2 Discrétisation en vitesse

Grille de vitesses

Commençons par une évidence : l'espace \mathbb{R} des vitesses doit être borné, puis discrétisé. Considérons donc que nous sommes en mesure de simuler correctement l'écoulement dans l'intervalle de vitesse $[v_{min}, v_{max}]$. Dans cet intervalle, nous nous donnons maintenant $n_v + 1$ points, ou vitesses discrètes, $v_j = j \Delta v$, avec $j = 0$ à n_v et $\Delta v = (v_{max} - v_{min})/n_v$. L'ensemble des vitesses discrètes est appelé grille de vitesses.

Discrétisation de l'équation cinétique

À présent, nous évaluons l'équation (11.1) en tout point de la grille de vitesses pour obtenir

$$\partial_t f(t, x, v_j) + v_j \partial_x f(t, x, v_j) = \frac{1}{\varepsilon \tau} (M[\rho, u, T](v_j) - f(t, x, v_j)).$$

Introduisons ensuite l'approximation $f_j(t, x)$ de $f(t, x, v_j)$, définie par le système de $n_v + 1$ équations

$$\partial_t f_j(t, x) + v_j \partial_x f_j(t, x) = \frac{1}{\varepsilon \tau} (M[\rho, u, T](v_j) - f_j(t, x)), \quad (11.3)$$

où ρ , u , et T doivent maintenant être définies à partir de la distribution discrète $(f_j(t, x))_{j=0}^{n_v}$.

Dans le cas continu, ces quantités sont définies via des intégrales de la distribution, il est donc naturel de les approcher par des formules de quadratures. Ainsi, nous utiliserons la formule du type point milieu suivante :

$$\rho = \sum_{j=0}^{n_v} f_j \Delta v, \quad \rho u = \sum_{j=0}^{n_v} v_j f_j \Delta v \quad E = \sum_{j=0}^{n_v} \frac{1}{2} |v_j|^2 f_j \Delta v.$$

La température et le temps de relaxation sont toujours définies comme dans le cas continu.

Choix des bornes et du pas de la grille de vitesses

Ce choix est essentiel : il doit permettre une approximation précise de la fonction de distribution en tout point du domaine spatial et pour tous les temps de la simulation. La grille doit donc être suffisamment large, et le nombre de points suffisamment grand, voir une illustration dans la figure 11.1.

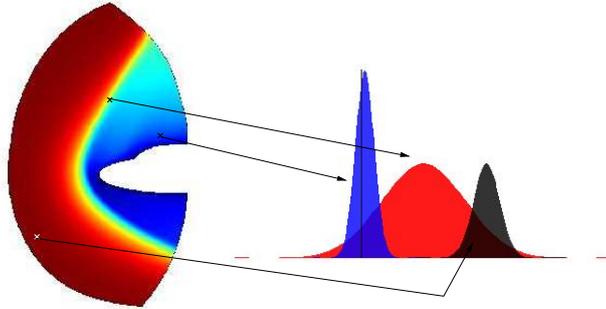


FIGURE 11.1 – Différentes distributions en trois points différents du domaine de calcul (écoulement hypersonique autour du nez d'une navette)

Cependant, ces informations sont rarement connues a priori. Il existe plusieurs méthodes pour les estimer, et une relativement simple consiste à utiliser ce que l'on sait des distributions de la donnée initiale et des données au bord. Ainsi, si la distribution initiale est la maxwellienne $M[\rho, u, T]$, il est raisonnable de chercher quelles sont les bornes minimales permettant de représenter l'essentiel de la distribution. Un calcul rapide nous montre que cet intervalle est $[u - 3\sqrt{T}, u + 3\sqrt{T}]$, puisque l'intégrale de $M[\rho, u, T]$ sur cet intervalle est

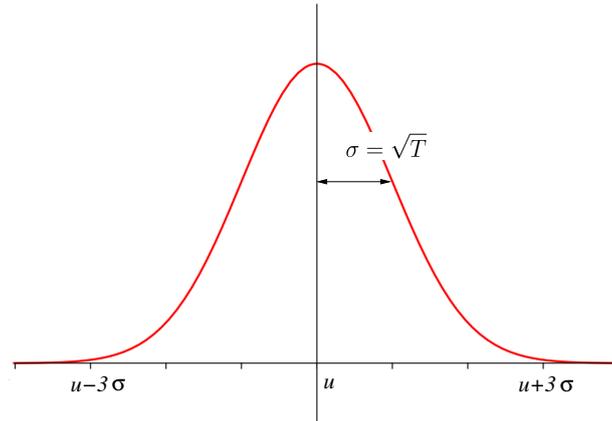


FIGURE 11.2 – Distribution maxwellienne et intervalle de confiance à 99%.

proche de l'intégrale totale à 99% près¹, voir la figure 11.2. Dans des cas plus complexes, il faut alors définir l'intervalle qui permet de décrire toutes les distributions (voir figure 11.3).

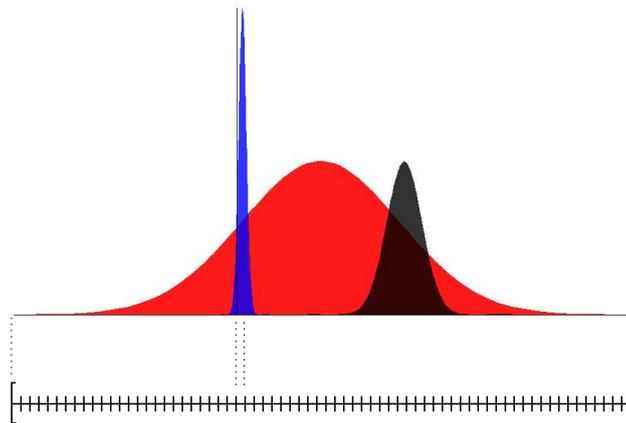


FIGURE 11.3 – Grille de vitesse construite pour capturer trois distributions : les bornes sont déterminées par la distribution rouge, et le pas par la distribution en bleu.

En ce qui concerne le nombre de points, on peut là encore le définir facilement dans le cas d'une maxwellienne : il suffit de prendre un pas Δv qui soit au plus égal à \sqrt{T} , de sorte que la maxwellienne soit décrite par au moins 7 points. De façon générale, il faut donc estimer la température minimum qui sera atteinte dans l'écoulement pour déterminer le pas adéquat.

Il est possible de vérifier a posteriori si la grille était suffisamment large et raffinée, et il peut être nécessaire de faire la simulation plusieurs fois pour aboutir à une grille correcte.

Il faut à présent discrétiser le système de $n_v + 1$ équations (11.3) en temps et en espace.

1. il s'agit là d'un résultat classique en probabilités : la maxwellienne $M[\rho, u, T]/\rho$ est la densité de probabilité de la loi normale centrée en u et d'écart type $\sigma = \sqrt{T}$, et l'intervalle $[u - 3\sigma, u + 3\sigma]$ a un niveau de confiance de 99%.

11.2.3 Discrétisation en espace et en temps

Nous nous donnons maintenant un maillage en espace avec $n_x + 1$ points $x_i = i\Delta x$, pour $i = 0$ à n_x et $\Delta x = 2/n_x$, ainsi que les instants $t_0 = 0, t_1 = \Delta t_1, t_2 = t_1 + \Delta t_2, \dots, t_{n+1} = t_n + \Delta t_n$, où Δt_n est un pas de temps qui sera déterminé par la condition de stabilité du schéma final.

Les équations (11.3) sont des équations d'advection couplées par un terme source. Nous proposons donc ci-dessous la discrétisation la plus élémentaire qui soit, par le schéma décentré. Ainsi, notons $f_{i,j}^n$ une approximation de $f_j(t_n, x_i)$ (qui est elle même une approximation de $f(t_n, x_i, v_j)$), et définissons-la par le schéma

$$\frac{f_{i,j}^{n+1} - f_{i,j}^n}{\Delta t_n} + v_j^+ \frac{f_{i,j}^n - f_{i-1,j}^n}{\Delta x} + v_j^- \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i,j}^n}{\Delta x} = \frac{1}{\varepsilon \tau_i^n} (M[\rho_i^n, u_i^n, T_i^n](v_j) - f_{i,j}^n), \quad (11.4)$$

pour $i = 1$ à $n_x - 1$, où les quantités macroscopiques sont définies par

$$\rho_i^n = \sum_{j=0}^{n_v} f_{i,j}^n \Delta v, \quad \rho_i^n u_i^n = \sum_{j=0}^{n_v} v_j f_{i,j}^n \Delta v \quad E_i^n = \sum_{j=0}^{n_v} \frac{1}{2} |v_j|^2 f_{i,j}^n \Delta v,$$

et où la température et la pression sont définies par

$$E_i^n = \frac{1}{2} \rho_i^n |u_i^n|^2 + \frac{1}{2} \rho_i^n T_i^n \quad \text{et} \quad p_i^n = \rho_i^n T_i^n,$$

et enfin le temps de relaxation vaut $\tau_i^n = \mu(T_i^n)/p_i^n$. Dans cet écriture, la notation v_j^\pm signifie la partie positive (resp. négative) de v_j , autrement dit : $v_j^+ = \max(v_j, 0)$ et $v_j^- = \min(v_j, 0)$. Ceci permet d'écrire de la même façon le schéma décentré à gauche pour les vitesses positives, et décentré à droite pour les vitesses négatives.

11.2.4 Prise en compte des conditions aux limites

Grâce à son caractère décentré, le schéma précédent nécessite la connaissance de $f_{i,j}^n$ aux noeuds de bords $i = 0$ et $i = n_x$, pour les vitesses rentrant dans le domaine. Nous traitons ici le cas du bord gauche uniquement, le bord droit se traitant de la même façon. Ainsi, nous devons donc définir $f_{0,j}^n$ pour toutes les vitesses v_j positives.

Si la distribution f_G est donnée, on pose alors

$$f_{0,j}^n = f_G(v_j), \quad \text{pour } j \text{ tel que } v_j > 0.$$

Si cette distribution est donnée par une loi de réflexion, on procède de la même façon. Par exemple, pour une réflexion spéculaire, on posera

$$f_{0,j}^n = f_{0,n_v-j}^n, \quad \text{pour } j = n_v/2 \text{ à } n_v$$

dans le cas où la grille de vitesse est symétrique par rapport à 0, avec un nombre de points impair.

11.2.5 Positivité du schéma

La principale propriété du schéma est la préservation de la positivité, qui lui donne une certaine stabilité.

Propriété 11.1. *Le schéma préserve la positivité de la solution sous la condition CFL*

$$\Delta t_n \leq \left(\frac{1}{\Delta t_{transp}} + \frac{1}{\Delta t_{coll}} \right)^{-1}, \quad (11.5)$$

où $\Delta t_{transp} = \frac{\Delta x}{\max_j |v_j|}$ et $\Delta t_{coll} = \min_i \varepsilon \tau_i^n$.

Démonstration. La preuve repose sur l'analyse suivante, très classique. Supposons que $f_{i,j}^n \geq 0$ à l'instant n , pour tout i et pour tout j , y compris pour les valeurs au bord. On met le schéma sous la forme

$$\begin{aligned} f_{i,j}^{n+1} &= f_{i,j}^n - \Delta t_n \left(v_j^+ \frac{f_{i,j}^n - f_{i-1,j}^n}{\Delta x} + v_j^- \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i,j}^n}{\Delta x} \right) + \frac{\Delta t_n}{\varepsilon \tau_i^n} (M[\rho_i^n, u_i^n, T_i^n](v_j) - f_{i,j}^n), \\ &= \left(1 - \Delta t_n \frac{|v_j|}{\Delta x} - \frac{\Delta t_n}{\varepsilon \tau_i^n} \right) f_{i,j}^n - \Delta t_n \frac{v_j^-}{\Delta x} f_{i+1,j}^n + \Delta t_n \frac{v_j^+}{\Delta x} f_{i-1,j}^n + \frac{\Delta t_n}{\varepsilon \tau_i^n} M[\rho_i^n, u_i^n, T_i^n](v_j), \end{aligned}$$

où l'on a utilisé la relation $v_j^+ + v_j^- = |v_j|$. On observe donc que $f_{i,j}^{n+1}$ est une combinaison linéaire de $f_{i,j}^n, f_{i+1,j}^n, f_{i-1,j}^n$ et $M[\rho_i^n, u_i^n, T_i^n](v_j)$. Tous les coefficients sont positifs sauf peut-être le premier, qui nécessite que le pas de temps soit assez petit. Ainsi, la positivité de ce coefficient équivaut à

$$\Delta t_n \leq \left(\frac{|v_j|}{\Delta x} + \frac{1}{\varepsilon \tau_i^n} \right)^{-1},$$

ce qui doit être vrai pour tout i et pour tout j , d'où la condition (11.5). Ainsi, tous les coefficients étant positifs, la positivité de $f_{i,j}^{n+1}$ est garantie. \square

Remarque 11.1. Les pas de temps Δt_{transp} et Δt_{coll} sont ceux associés à la stabilité du schéma si un seul des deux phénomènes transport ou collision est présent. La condition CFL signifie donc que le pas de temps global doit être plus petit que la moitié de la moyenne harmonique des deux pas de temps Δt_{transp} et Δt_{coll} .

Chapitre 12

Exercices

Certains exercices ont déjà été donnés dans le texte qui précède. En voici quelques autres.

Exercice 12.1. On considère le problème de Riemann en une dimension d'espace pour le transport libre (c.-à-d. sans collision) :

$$\begin{aligned} \partial_t f + v_x \partial_x f &= 0, & x \in \mathbb{R}, \\ f(t, -\infty, v) &= M[\rho_L, 0, T_L](v) & \text{et} & \quad f(t, +\infty, v) = M[\rho_R, 0, T_R](v) \end{aligned}$$

Calculer la solution exacte de cette équation, et en déduire une formule explicite pour la densité, la vitesse, et la température.

Exercice 12.2. Montrer que l'opérateur de collision BGK est invariant par transformation orthogonale, c.-à-d.

$$Q_{BGK}(f(\mathcal{O}))(v) = Q_{BGK}(f)(\mathcal{O}v)$$

pour tout v et toute transformation orthogonale \mathcal{O} . (aide : les transformations orthogonales sont celles qui conservent la norme, et leur jacobien vaut ± 1). Montrer ensuite la même propriété pour l'opérateur de Boltzmann (voir appendice A.4).

Exercice 12.3. On considère un gaz enfermé entre deux plaques planes infinies de température T_w dont l'une se déplace à la vitesse u_w (écoulement de Couette). Les collisions du gaz avec la paroi sont modélisées par la réflexion diffuse. On étudie le problème stationnaire associé

$$\begin{aligned} v \cdot \nabla F &= Q(F), & (x, y, z) \in [0, L] \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}, \\ F(t, x = 0, v_x > 0) &= M[\rho_G, 0, T_w], & \text{et} & \quad F(t, x = L, v_x < 0) = M[\rho_D, u_w, T_w], \end{aligned}$$

avec ρ_G et ρ_D les densités de masse des molécules réfléchies, définies par (7.3). On suppose que ce problème admet une unique solution.

1. Montrer que F ne dépend pas de y et de z , c.-à-d. que le problème est unidimensionnel dans la direction x . (aide : montrer que $g(x, y, z, v) = F(x, y+a, z+b, v)$ est solution).
2. Montrer que $u_x = 0$, et que Σ_{xy} et Σ_{xx} sont constants. (aide : utiliser les lois de conservations et les conditions aux limites).
3. Montrer que F est paire par rapport à v_z . (aide : utiliser l'exercice précédent et la symétrie par rapport au plan $v_z = 0$).

4. En déduire que $u_z = 0$ et écrire le problème unidimensionnel en espace satisfait par F .
5. Dans le cas où l'opérateur de collision est l'opérateur BGK, montrer que les trois distributions réduites définies par

$$\begin{aligned}
 f(t, x, v_x) &:= \int_{\mathbb{R}^2} F(t, x, v_x, v_y, v_z) dv_y dv_z, \\
 g(t, x, v_x) &:= \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{2}(v_y^2 + v_z^2) F(t, x, v_x, v_y, v_z) dv_y dv_z, \\
 h(t, x, v_x) &:= \int_{\mathbb{R}^2} v_y F(t, x, v_x, v_y, v_z) dv_y dv_z,
 \end{aligned}$$

satisfont un système d'équations de type BGK couplé, fermé.

Chapitre 13

TP : onde de choc dans un gaz

Le but de ce TP est de comparer différents modèles qui régissent l'évolution d'un gaz soumis à une onde de choc. Ce problème, appelé problème de Sod, est le suivant. On considère un gaz initialement constitué de deux états au repos, de densité et température constantes, séparés par une discontinuité. À l'instant $t = 0$, on laisse le gaz évoluer librement. Dans ce TP, le problème sera simplifié en considérant un gaz fictif dont les molécules ne peuvent se déplacer que dans une seule dimension de l'espace. Toutes les équations seront écrites en variables adimensionnées. Les programmes utiles à la réalisation de ce TP sont à télécharger sur la page

http://www.math.u-bordeaux.fr/~lmieusse/PAGE_WEB/enseignement.html

13.1 Régime moléculaire libre

Dans cette section, on néglige l'effet des collisions entre molécules. L'évolution du gaz peut être décrit par l'équation cinétique suivante :

$$\partial_t f + v \partial_x f = 0, \quad (13.1)$$

où $f(t, x, v)$ est la fonction de distribution. La variable d'espace x est dans \mathbb{R} , ainsi que la variable d'espace v . Le problème est complété par la donnée initiale discontinue

$$f(0, x, v) = \begin{cases} M[\rho_G, 0, T_G] & \text{si } x \leq 0, \\ M[\rho_D, 0, T_D] & \text{si } x > 0. \end{cases}$$

où $M[\rho, u, T]$ est la distribution maxwellienne associée aux grandeurs macroscopiques densité ρ , vitesse u , et température T , définie par

$$M[\rho, u, T](v) = \frac{\rho}{\sqrt{2\pi T}} \exp\left(-\frac{|v - u|^2}{2T}\right).$$

Cette équation peut être résolue de façon exacte par la méthode des caractéristiques (vue en première année), et l'on trouve la solution

$$f(t, x, v) = f(0, x - vt, v) = \begin{cases} M[\rho_G, 0, T_G] & \text{si } x - vt \leq 0, \\ M[\rho_D, 0, T_D] & \text{si } x - vt > 0. \end{cases}$$

Les variables macroscopiques décrivant le gaz sont définies par les relations

$$\rho = \int_{\mathbb{R}} f dv, \quad \rho u = \int_{\mathbb{R}} v f dv, \quad E = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2} |v|^2 f dv,$$

et l'on rappelle que la température et la pression sont définies par

$$E = \frac{1}{2} \rho |u|^2 + \frac{1}{2} \rho T \quad \text{et } p = \rho T. \quad (13.2)$$

On peut calculer l'expression analytique de ces quantités pour trouver :

$$\begin{aligned} \rho(t, x) &= -\frac{1}{2} \rho_G \left(\operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2T_G t}} \right) - 1 \right) + \frac{1}{2} \rho_D \left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2T_D t}} \right) \right) \\ \rho u(t, x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{T_G} \rho_G e^{-\frac{1}{2} \frac{x^2}{T_G t}} - \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sqrt{T_D} \rho_D e^{-\frac{1}{2} \frac{x^2}{T_D t}} \\ E(t, x) &= \frac{1}{4} \rho_G \left(\sqrt{2} x e^{-\frac{1}{2} \frac{x^2}{T_G t}} T_G - T_G^{3/2} \sqrt{\pi} \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2T_G t}} \right) t + T_G^{3/2} \sqrt{\pi} t \right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{T_G}} t^{-1} \\ &\quad - \frac{1}{4} \rho_D \left(-T_D^{3/2} \sqrt{\pi} t + \sqrt{2} x e^{-\frac{1}{2} \frac{x^2}{T_D t}} T_D - T_D^{3/2} \sqrt{\pi} \operatorname{erf} \left(\frac{x}{\sqrt{2T_D t}} \right) t \right) \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{T_D}} t^{-1} \end{aligned}$$

où la fonction erf est la fonction d'erreur définie sur \mathbb{R} par

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-s^2} ds.$$

1. téléchargez le programme `t_libre.f90` qui calcule et trace les variables $\rho(t, x)$, $u(t, x)$, $p(t, x)$ et $T(t, x)$ dans des fichiers au temps $t = 0.2$. Les variables initiales sont données par

$$\begin{aligned} \rho_G &= 1, & u_G &= 0 & T_G &= 1, \\ \rho_D &= 0.125, & u_D &= 0 & T_D &= 0.8. \end{aligned}$$

Ces variables sont tracées dans le domaine spatial $[-1, 1]$ avec 300 points.

2. Compilez et exécutez ce programme, puis visualisez les courbes.
3. Interprétez les résultats.

13.2 Régime raréfié : équation BGK

Quand on prend en compte les collisions entre molécules, le gaz peut être modélisé par l'équation BGK suivante :

$$\partial_t f + v \partial_x f = \frac{1}{\varepsilon \tau} (M[\rho, u, T] - f), \quad (13.3)$$

où ε est le nombre de Knudsen. On considère l'équation (13.3) avec la même donnée initiale que précédemment. Pour la résolution numérique de cette équation, on va tronquer le domaine spatial pour se placer dans le domaine $[-1, 1]$. Aux bords du domaine, on se donne des conditions de Dirichlet compatibles avec la donnée initiale, soit :

$$f(t, x = -1, v > 0) = M[\rho_G, u_G, T_G] \quad \text{et} \quad f(t, x = 1, v < 0) = M[\rho_D, u_D, T_D].$$

Pour calculer le temps de relaxation τ , on utilisera la formule $\tau = \mu(T)/p$ avec $\mu(T) = T$, soit $\tau = 1/\rho$.

Le but de cette section est d'écrire le programme `bgk.f90` qui résoud numériquement cette équation. Pour cela, il faut utiliser la méthode numérique décrite section 11.

Première version du code. Dans un premier temps, on négligera le terme de collision pour se ramener à l'équation du transport libre étudiée dans la section précédente. Proposez un schéma numérique pour résoudre cette équation. Comment choisir les bornes et le nombre de points de la variable de vitesse? Comparez vos résultats à la solution exacte obtenue précédemment, et modifiez vos paramètres de discrétisation pour obtenir une solution correcte.

aide : on pourra utiliser les tableaux `v(0:nv)`, `fn(0:nx,0:nv)`, `fnpun(1:nx,nv)`, `rho(0:nx)`, `rho(0:nx)`, `u(0:nx)`, `E(0:nx)`, `T(0:nx)`, ainsi qu'une fonction qui calcule la maxwellienne $M[\rho, u, T](v)$ pour ρ, u, T, v donnés. La structure du programme doit être la suivante :

- lecture des donnees physiques et geometriques
- allocation des tableaux
- initialisation (calcul de fn)
- boucle en temps
 - calcul du pas de temps
 - une iteration du schema (calcul de fnpun)
 - mise a jour des quantites macro
 - sorties fichiers (tous les N pas de temps)

On pourra utiliser le squelette de code `bgk.f90` et le module `mod_parametres.f90`.

Code raréfié complet. Modifiez votre programme pour tenir compte du terme de collision. En prenant le nombre de Knudsen ε égal à 10, vous devriez obtenir une solution proche de celle du transport libre.

Influence de ε . Observez comment la solution se modifie quand ε devient plus petit. Observez aussi l'influence de ε sur le temps calcul.

13.3 Régime dense

On se place maintenant dans le régime dense, défini par un nombre de Knudsen inférieur à 0.01.

1. Montrez que quand ε tend vers 0, les variables ρ , u et E satisfont les équations d'Euler

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \partial_x \rho u &= 0, \\ \partial_t \rho u + \partial_x (\rho u^2 + p) &= 0, \\ \partial_t E + \partial_x (E + p)u &= 0,\end{aligned}$$

$O(\varepsilon)$ près.

2. Téléchargez le programme `euler.f90` résolvant ces équations d'Euler.
3. Compilez puis lancez ce programme et comparez ses résultats à ceux obtenus avec le programme précédent : cela confirme-t-il votre analyse ?

Annexe A

Compléments

A.1 Notations : opérateurs différentiels et vectoriels

Notons $x = (x_1, x_2, x_3)$ la variable de position dans \mathbb{R}^3 . Les notations utilisées dans ce cours sont les suivantes :

Opérateur ∇ (nabla). On peut considérer cet opérateur comme l'opérateur vectoriel

$$\nabla = \begin{pmatrix} \partial_1 \\ \partial_2 \\ \partial_3 \end{pmatrix}$$

où ∂_i est l'opérateur de dérivée partielle par rapport à x_i .

Gradient d'une fonction scalaire. Si ϕ est une fonction scalaire de x , alors son gradient est le vecteur

$$\nabla\phi(x) = \begin{pmatrix} \partial_1\phi(x) \\ \partial_2\phi(x) \\ \partial_3\phi(x) \end{pmatrix}.$$

Gradient et divergence d'une fonction vectorielle. Si u est un vecteur dépendant de x , de composantes u_1 , u_2 , et u_3 , alors son gradient est le tenseur ∇u de composantes

$$(\nabla u)_{ij} = \partial_j u_i.$$

Sa divergence est le scalaire défini par

$$\nabla \cdot u = \partial_i u_i,$$

où l'on utilise dans le membre de droite la convention d'Einstein qui veut que tout indice répété est supposé sommé de 1 à 3. Cette notation facilite grandement certains calculs. Ici, elle signifie donc $\nabla \cdot u = \partial_1 u_1 + \partial_2 u_2 + \partial_3 u_3$.

Divergence d'une fonction tensorielle. Si A est un tenseur dépendant de x , de composantes A_{ij} , alors sa divergence est le vecteur $\nabla \cdot A$ de composantes

$$(\nabla \cdot A)_i = \partial_j A_{ij}.$$

Opérateur $(u \cdot \nabla)$ Cet opérateur est obtenu en effectuant le produit scalaire formel entre u et ∇ . On obtient ainsi pour toute fonction scalaire ou vectorielle

$$(u \cdot \nabla)\phi = u_i \partial_i \phi.$$

Produit tensoriel Si a et b sont deux vecteurs, alors $a \otimes b$ est le tenseur de composantes

$$(a \otimes b)_{ij} = a_i b_j.$$

A.2 Intégrales gaussiennes

A.2.1 Intégrales de gaussienne unidimensionnelle

En intégrant par parties l'intégrale

$$I_n = \int_{\mathbb{R}} \frac{\zeta^{2n}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} d\zeta,$$

on trouve la relation de récurrence $I_n = (2n - 1)I_{n-1}$. Le premier terme de cette récurrence est $I_0 = 1$, qui s'obtient par une astuce classique consistant à passer par une intégrale dans \mathbb{R}^2 puis à passer en coordonnées polaires :

$$\begin{aligned} I_0 &= \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} d\zeta, \\ I_0^2 &= \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{x^2+y^2}{2}} dx dy, \\ &= \int_0^{2\pi} \int_0^{+\infty} \frac{1}{2\pi} e^{-\frac{r^2}{2}} r dr d\theta \\ &= \int_0^{+\infty} r e^{-\frac{r^2}{2}} dr \\ &= [-e^{-\frac{r^2}{2}}]_0^{+\infty} = 1. \end{aligned}$$

On obtient ainsi les expressions suivantes :

$$\begin{aligned} I_0 &= 1, \\ I_1 &= 1, \\ I_2 &= 3, \\ I_3 &= 15, \\ I_4 &= 105. \end{aligned}$$

De façon plus générale, une intégration par parties donne la relation de récurrence :

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{\zeta^{m+1}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} d\zeta = m \int_{\mathbb{R}} \frac{\zeta^{m-1}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} d\zeta$$

pour tout $m \geq 1$.

A.2.2 Moments de la maxwellienne absolue M_0 en dimension quelconque

Nous définissons $M_0(V)$ par

$$M_0(V) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{|V|^2}{2}\right),$$

où $V \in \mathbb{R}^d$. Dans la suite de cette section, $\langle \phi \rangle$ désigne l'intégrale sur \mathbb{R}^d de toute fonction ϕ .

Calcul de $\langle M_0 \rangle$: On trouve

$$\begin{aligned} \langle M_0 \rangle &= \prod_{i=1:d} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v_i^2}{2}} dV_j \\ &= \prod_{i=1:d} I_0 = 1. \end{aligned}$$

Calcul de $\langle V_i^2 M_0 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle V_i^2 M_0 \rangle &= \int_{\mathbb{R}} \frac{V_i^2}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v_i^2}{2}} dV_i \prod_{j \neq i} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v_j^2}{2}} dV_j \\ &= I_1 \prod_{j \neq i} I_0 = 1. \end{aligned}$$

Calcul de $\langle |V|^2 M_0 \rangle$: D'après la relation précédente, on a $\langle |V|^2 M_0 \rangle = \sum_i \langle v_i^2 M_0 \rangle = d$.

Calcul de $\langle V_i^4 M_0 \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle V_i^4 M_0 \rangle &= \int_{\mathbb{R}^d} \frac{V_i^4}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{|V|^2}{2}} dV \\ &= \int_{\mathbb{R}} \frac{V_i^4}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v_i^2}{2}} dV_i \prod_{j \neq i} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{v_j^2}{2}} dV_j \\ &= I_2 \prod_{j \neq i} I_0 \\ &= 3. \end{aligned}$$

Calcul de $\langle V_i^2 V_k^2 M_0 \rangle$: si $k \neq i$, alors

$$\begin{aligned} \langle V_i^2 V_k^2 M_0 \rangle &= \int_{\mathbb{R}} \frac{V_i^2}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{V_i^2}{2}} dV_i \int_{\mathbb{R}} \frac{V_k^2}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{V_k^2}{2}} dV_k \prod_{j \neq i, \neq k} \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{V_j^2}{2}} dV_j \\ &= I_1 I_1 \prod_{j \neq i, \neq k} I_0 = 1. \end{aligned}$$

Calcul de $\langle V_i V_j |V|^2 M_0(V) \rangle$: Si $i \neq j$, cette intégrale est nulle, par parité de M_0 . Si $i = j$, on a

$$\begin{aligned} \langle V_i V_j |V|^2 M_0(V) \rangle &= \langle V_i^2 |V|^2 M_0(V) \rangle \\ &= \sum_j \langle V_i^2 V_j^2 M_0 \rangle \\ &= \langle V_i^4 M_0 \rangle + \sum_{j \neq i} \langle V_i^2 V_j^2 M_0 \rangle \tag{A.1} \\ &= 3 + (d-1) \\ &= d+2, \end{aligned}$$

d'après les formules précédentes. On peut donc écrire

$$\langle V_i V_j |V|^2 M_0(V) \rangle = (d+2) \delta_{ij}.$$

Calcul de $\langle |V|^4 M_0 \rangle$: On utilise le changement de variables polaires : $V = \zeta \omega$, avec $\zeta = |V|$ et $\omega = v/|V|$ appartient à la sphère unité S^{d-1} de \mathbb{R}^d . Alors $dV = \zeta^{d-1} d\zeta d\omega$ et l'on trouve :

$$\begin{aligned} \langle |V|^4 M_0 \rangle &= \int_{\mathbb{R}^d} \frac{|V|^4}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{|V|^2}{2}} dV \\ &= \int_{S^{d-1}} \int_0^{+\infty} \frac{\zeta^4}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} \zeta^{d-1} d\zeta d\omega \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d-1}{2}}} \int_{S^{d-1}} d\omega \int_0^{+\infty} \frac{\zeta^{d+3}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} d\zeta. \end{aligned}$$

En utilisant deux fois la relation de récurrence de la section précédente, on trouve :

$$\begin{aligned} \langle |V|^4 M_0 \rangle &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d-1}{2}}} \int_{S^{d-1}} d\omega (d+2)d \int_0^{+\infty} \frac{\zeta^{d-1}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} d\zeta \\ &= (d+2)d \int_{S^{d-1}} \int_0^{+\infty} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} \zeta^{d-1} d\zeta d\omega \\ &= (d+2)d \int_{\mathbb{R}^d} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{|V|^2}{2}} dV \\ &= (d+2)d \langle M_0 \rangle \\ &= (d+2)d. \end{aligned}$$

Calcul de $\langle |V|^6 M_0 \rangle$: en suivant pas à pas les étapes du calcul précédent (avec une intégration par parties supplémentaire), on trouve

$$\begin{aligned}
\langle |V|^6 M_0 \rangle &= \int_{S^{d-1}} \int_0^{+\infty} \frac{\zeta^6}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} \zeta^{d-1} d\zeta d\omega \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d-1}{2}}} \int_{S^{d-1}} d\omega \int_0^{+\infty} \frac{\zeta^{d+5}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} d\zeta \\
&= (d+4)(d+2)d \langle M_0 \rangle \\
&= (d+4)(d+2)d.
\end{aligned} \tag{A.2}$$

Calcul de $\langle |V|^4 V_i V_j M_0 \rangle$: Cette intégrale est non nulle seulement si $i \neq j$, et donc on a

$$\begin{aligned}
\langle |V|^4 V_i V_j M_0 \rangle &= \langle |V|^4 V_i^2 M_0 \rangle \delta_{ij}. \\
&= \frac{1}{d} \langle |V|^4 |V|^2 M_0 \rangle \delta_{ij} = \frac{1}{d} \langle |V|^6 M_0 \rangle \delta_{ij}. \\
&= (d+4)(d+2) \delta_{ij}
\end{aligned} \tag{A.3}$$

d'après (A.2).

Calcul de $\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle$: Cette intégrale est donnée par la formule

$$\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = \delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}. \tag{A.4}$$

Démonstration.

cas 1 : $i \neq j$

- cas 1.1 : si $(k, l) \neq (i, j)$ et $(k, l) \neq (j, i)$ alors $\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = 0$ par parité de M_0 .
- cas 1.2 : si $(k, l) = (i, j)$ alors $\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = \langle V_i^2 V_j^2 M_0 \rangle = 1$, d'après une des formules démontrées ci-dessus.
- cas 1.3 : si $(k, l) = (j, i)$ on a le même résultat : $\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = 1$

cas 2 : si $i = j$ alors $\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = \langle V_i^2 V_k V_l M_0 \rangle$

- cas 2.1 : si $k \neq l$, alors $\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = 0$ par parité de M_0 .
- cas 2.2 : si $k = l$, alors $\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = \langle V_i^2 V_k^2 M_0 \rangle$
 - cas 2.2.1 : si $i = k$, alors $\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = \langle V_i^4 M_0 \rangle = 3$, d'après une des formules démontrées ci-dessus
 - cas 2.2.2 : si $i \neq k$, alors $\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = \langle V_i^2 V_k^2 M_0 \rangle = 1$, d'après une des formules démontrées ci-dessus.

On peut résumer les deux cas 1 et 2 de la façon suivante :

- si $i \neq j$: $\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}$
- si $i = j$: $\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = \delta_{kl} (2\delta_{ik} + 1)$

On peut les rassembler en une seule formule en définissant C tel que

$$\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = C \delta_{ij} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}.$$

Pour cela, en comparant la formule précédente et celle obtenue pour $i = j$, on voit que C doit satisfaire

$$\delta_{kl} (2\delta_{ik} + 1) = C + 2\delta_{ik} \delta_{il},$$

et donc que $C = \delta_{kl}(2\delta_{ik} + 1) - 2\delta_{ik}\delta_{il}$. Il est alors facile de voir que $C = 0$ si $k \neq l$ et $C = 1$ si $k = l$, ce qui implique en définitive que C vaut simplement $C = \delta_{kl}$. Ceci conclut la démonstration. \square

A.2.3 Calcul de $\langle V \otimes V (B(V) : \nabla_x u) M_0(V) \rangle$

On commence par démontrer le lemme suivant, qui est une corollaire de la propriété précédente.

Lemme A.1. *Pour toute matrice P , on a :*

$$\langle V \otimes V ((PV) \cdot V) M_0 \rangle = P + P^T + \text{Trace}(P)I. \quad (\text{A.5})$$

Démonstration. En effet, cette intégrale s'écrit, en notation indicielle, $\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle P_{kl}$, où l'on adopte la convention d'Einstein (qui veut que tout indice répété est supposé être sommé, comme k et l ici). D'après la formule démontrée ci-dessus, on a

$$\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle P_{kl} = \delta_{ij} P_{kk} + P_{ij} + P_{ji}.$$

Comme $P_{kk} = \text{Trace}(P)$, on obtient le résultat annoncé. \square

À présent, rappelons que $B(V) = V \otimes V - \frac{1}{d}|V|^2 I_d$, ce qui, en notation indicielle, donne

$$\begin{aligned} \langle V \otimes V (B(V) : \nabla_x u) M_0(V) \rangle &= \langle V_i V_j \left((V_k V_l - \frac{1}{d}|V|^2 \delta_{kl}) \partial_l u_k \right) M_0(V) \rangle \\ &= \langle V_i V_j V_k V_l M_0(V) \rangle \partial_l u_k - \langle V_i V_j |V|^2 M_0(V) \rangle \frac{1}{d} \delta_{kl} \partial_l u_k \end{aligned}$$

On utilise alors le lemme A.1 et la relation $\delta_{kl} \partial_l u_k = \partial_k u_k = \nabla_x \cdot u$ pour trouver

$$\begin{aligned} \langle V \otimes V (B(V) : \nabla_x u) M_0(V) \rangle &= \nabla_x u + (\nabla_x u)^T + \nabla_x \cdot u - (d+2) \delta_{ij} \frac{1}{d} \nabla_x \cdot u \\ &= \nabla_x u + (\nabla_x u)^T - \frac{2}{d} \nabla_x \cdot u I_d. \end{aligned}$$

A.2.4 Calcul de $\langle \frac{1}{2} V |V|^2 (A(V) \cdot \nabla_x T) M_0(V) \rangle$

On commence par démontrer le lemme suivant.

Lemme A.2. *Pour tout vecteur ξ , on a*

$$\langle |V|^2 V A(V) \cdot \xi M_0(V) \rangle = (d+2)\xi.$$

Démonstration. Rappelons que $A(V) = (\frac{1}{2}|V|^2 - \frac{d+2}{2})V$, et on trouve alors

$$\begin{aligned} \langle |V|^2 V A(V) \cdot \xi M_0(V) \rangle &= \frac{1}{2} \langle |V|^4 V_i V_j M_0 \rangle \xi_j - \frac{d+2}{2} \langle |V|^2 V_i V_j M_0 \rangle \xi_j \\ &= \frac{1}{2} (d+4)(d+2) \delta_{ij} \xi_j - \frac{d+2}{2} (d+2) \delta_{ij} \xi_j \\ &= (d+2)\xi \end{aligned}$$

d'après (A.1) et (A.3). \square

On peut appliquer directement ce lemme avec $\xi = \nabla_x T$ pour trouver

$$\langle \frac{1}{2} V |V|^2 (A(V) \cdot \nabla_x T) M_0(V) \rangle = \frac{(d+2)}{2} \nabla_x T.$$

A.3 Dérivées de la maxwellienne

Notons α l'une des variables t ou x_i . Alors on trouve :

$$\begin{aligned} \partial_\alpha M[\rho, u, T] &= M[\rho, u, T] \partial_\alpha \ln M[\rho, u, T] \\ &= M[\rho, u, T] \partial_\alpha \left(\ln \rho - \frac{d}{2} \ln T - \frac{|v-u|^2}{2T} + Cte \right) \\ &= M[\rho, u, T] \left(\frac{\partial_\alpha \rho}{\rho} + \frac{v-u}{T} \cdot \partial_\alpha u + \left(\frac{|v-u|^2}{2T} - \frac{d}{2} \right) \frac{\partial_\alpha T}{T} \right). \end{aligned}$$

D'où

$$\partial_t M[\rho, u, T] = M[\rho, u, T] \left(\frac{\partial_t \rho}{\rho} + \frac{v-u}{T} \cdot \partial_t u + \left(\frac{|v-u|^2}{2T} - \frac{d}{2} \right) \frac{\partial_t T}{T} \right),$$

et

$$v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T] = M[\rho, u, T] \left(v \cdot \frac{\nabla_x \rho}{\rho} + v \cdot \left((\nabla_x u) \frac{v-u}{T} \right) + \left(\frac{|v-u|^2}{2T} - \frac{d}{2} \right) v \cdot \frac{\nabla_x T}{T} \right),$$

et donc

$$\begin{aligned} &\partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T] \\ &= \left(\frac{1}{\rho} (\partial_t \rho + v \cdot \nabla_x \rho) + \frac{v-u}{T} \cdot (\partial_t u + (\nabla_x u) v) + \left(\frac{|v-u|^2}{2T} - \frac{d}{2} \right) \frac{1}{T} (\partial_t T + v \cdot \nabla_x T) \right) M[\rho, u, T]. \end{aligned}$$

A.4 L'opérateur de collision de Boltzmann

Pour calculer la variation du nombre de molécules de vitesse v au cours du temps due aux collisions, on définit d'abord le modèle de collision. On ne tient compte que des collisions entre deux molécules, c'est-à-dire des collisions binaires. Soit deux molécules de vitesses v et v_* avant collision, et notons v' et v'_* leurs vitesses après collision. La collision est supposée "élastique", c'est-à-dire que la quantité de mouvement et l'énergie totale des deux molécules ne change pas durant la collision. Cette conservation se traduit par :

$$v + v_* = v' + v'_*, \tag{A.6}$$

$$|v|^2 + |v_*|^2 = |v'|^2 + |v'_*|^2. \tag{A.7}$$

Les quantités v et $\frac{1}{2}|v|^2$ sont dites *invariants collisionnels*. Ce système est un système de $3 + 1 = 4$ équations à 6 inconnues (les composantes de v' et v'_*). S'il admet une solution, celle-ci peut donc s'écrire en fonction de v , v_* plus deux autres paramètres. Notons alors ω le vecteur unitaire qui donne le changement de direction de v en v' : on peut donc écrire $v' - v = A\omega$, où A est un scalaire à déterminer. La relation (A.6) implique que le changement

de la deuxième molécule est l'opposé du vecteur précédent : $v'_\star - v_\star = -A \cdot \omega$. On peut ainsi écrire v' et v'_\star ainsi :

$$v' = v + A\omega, \quad \text{et} \quad v'_\star = v_\star - A\omega. \quad (\text{A.8})$$

Il suffit ensuite de reporter ces expressions dans (A.7) pour obtenir la valeur $A = \omega \cdot (v_\star - v)$. Les vitesses post-collisionnelles s'écrivent donc ainsi :

$$v' = v + (\omega \cdot (v_\star - v))\omega, \quad \text{et} \quad v'_\star = v_\star - (\omega \cdot (v_\star - v))\omega. \quad (\text{A.9})$$

Nous avons donc écrit la solution du système (A.6)-(A.7) en fonction de deux paramètres (puisque ω est unitaire). Cette solution n'est bien sûr pas complète, puisque le vecteur de changement de direction ω reste indéterminé. Ce vecteur dépend en fait de la loi d'interaction entre les molécules, mais nous n'aurons pas besoin de son expression ici.

Le taux de variation du nombre de molécules de vitesse v au cours du temps due aux collisions peut alors se calculer. Cela est assez complexe, et nous ne verrons pas ici le détail de cette construction. Nous donnons seulement le résultat qui est l'opérateur de collision de Boltzmann :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = Q(f) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_\star) (f(v'_\star) f(v') - f(v_\star) f(v)) d\omega dv_\star, \quad (\text{A.10})$$

où l'on a omis les variables t et x dans cette expression. Cette intégrale prend en compte toutes les vitesses v_\star des molécules pouvant impacter une molécule de vitesse v et toutes les changements de directions possibles ω . Le terme $B(\omega, v - v_\star) f(v'_\star) f(v')$ est la masse des molécules qui avaient une vitesse $v_\star \pm dv_\star$ avant la collision, et qui ont une vitesse v après. Le terme $B(\omega, v - v_\star) f(v_\star) f(v)$ est la masse des molécules qui avaient une vitesse v avant la collision, et ont une vitesse $v_\star \pm dv_\star$ après la collision. Le terme $B(\omega, v - v_\star)$ est le "noyau de collision", qui dépend de la loi d'interaction entre les molécules. Par exemple, pour des molécules assimilées à des "sphères dures" (comme des boules de billard), on peut montrer que $B(\omega, v - v_\star) = |\omega \cdot (v - v_\star)|$. Plus généralement, B a la forme suivante

$$B(\omega, v - v_\star) = |v - v_\star| \Sigma(|v - v_\star|, |\omega \cdot (v - v_\star)| / |v - v_\star|). \quad (\text{A.11})$$

A.4.1 Propriétés de conservation de $Q(f)$

Les propriétés que nous étudions ici sont énoncées et démontrées d'une façon formelle, c'est-à-dire que nous ne précisons pas quelles sont conditions pour lesquelles les intégrales utilisées sont définies.

Nous commençons par une propriété des collisions binaires.

Propriété A.1. *Si (v', v'_\star) sont définies par (A.9), alors la vitesse relative des deux molécules ne change pas de norme durant la collision, c'est-à-dire*

$$|v' - v'_\star| = |v - v_\star|, \quad (\text{A.12})$$

et son angle par rapport à ω est modifié de sorte que :

$$(v' - v'_\star) \cdot \omega = -(v - v_\star) \cdot \omega. \quad (\text{A.13})$$

Démonstration. Ces deux relations sont des conséquences assez simples des lois de conservations de quantité de mouvement et d'énergie cinétique. Tout d'abord, il suffit de retrancher le carré de (A.6) à deux fois (A.7) pour trouver (A.12). Ensuite, on retranche les deux égalités de (A.9) : on trouve $v' - v'_* = (I_3 - 2\omega\omega^T)(v - v_*)$, c'est-à-dire que la vitesse relative après collision est le symétrique de la vitesse relative avant collision par rapport au plan orthogonal à ω . En multipliant cette relation scalairement par ω , on trouve ensuite (A.13). \square

À présent, nous allons voir que les lois de conservations microscopiques (A.6) et (A.7) se traduisent par une propriété importante : une formulation faible de l'opérateur de collision. Elle un peu abstraite au premier abord, mais est fondamentale pour établir les propriétés de conservation et d'entropie que nous verrons par la suite.

Propriété A.2. *Pour toute fonction ϕ de v , on a :*

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v)Q(f) dv \\ &= \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_*) (f(v'_*)f(v') - f(v_*)f(v)) (\phi(v_*) + \phi(v) - \phi(v'_*) - \phi(v')) d\omega dv_* dv. \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Démonstration. Cette relation s'obtient en faisant plusieurs changements de variables astucieux pour obtenir 4 expressions équivalentes du membre de gauche de (A.14). Le membre de droite n'est alors que la moyenne de ces 4 expressions.

Pour écrire clairement ces changements de variables, commençons par écrire la formule (A.9) liant les vitesses avant et après collision sous la forme fonctionnelle suivante. Pour v et v_* données, on note $C^\omega(v, v_*) \in \mathbb{R}^2$ défini par

$$\begin{aligned} C_1^\omega(v, v_*) &= v + (\omega \cdot (v_* - v))\omega \\ C_2^\omega(v, v_*) &= v_* - (\omega \cdot (v_* - v))\omega. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Commençons maintenant par développer le membre de gauche en utilisant la notation précédente. Nous obtenons :

Expression 1.

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v)Q(f) dv \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_*) \left(f(C_2^\omega(v, v_*))f(C_1^\omega(v, v_*)) - f(v_*)f(v) \right) \phi(v) d\omega dv_* dv. \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Expression 2.

Ici, nous faisons un jeu d'écriture en échangeant v et v_* , ce qui est légitime : ces variables étant muettes, on peut les noter de n'importe quelle façons. On trouve donc

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v)Q(f) dv \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v_* - v) \left(f(C_2^\omega(v_*, v))f(C_1^\omega(v_*, v)) - f(v)f(v_*) \right) \phi(v_*) d\omega dv dv_*. \end{aligned}$$

Or d'après (A.15), on voit facilement que $C_2^\omega(v_*, v) = C_1^\omega(v, v_*)$ et $C_1^\omega(v_*, v) = C_2^\omega(v, v_*)$, ce qui est logique : si on échange les deux vitesses avant collision, les deux vitesses après collision sont aussi échangées. En outre, B étant paire par rapport à son deuxième variable (voir (A.11)), on a $B(\omega, v_* - v) = B(\omega, v - v_*)$. On trouve donc finalement

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v)Q(f) dv \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_*) \left(f(C_1^\omega(v, v_*))f(C_2^\omega(v, v_*)) - f(v)f(v_*) \right) \phi(v_*) d\omega dv_* dv, \end{aligned}$$

ce qui, en remettant les termes dans le bon ordre, peut s'écrire aussi

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v)Q(f) dv \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_*) \left(f(C_2^\omega(v, v_*))f(C_1^\omega(v, v_*)) - f(v_*)f(v) \right) \phi(v_*) d\omega dv_* dv. \end{aligned} \tag{A.17}$$

On retrouve la même expression que (A.16), sauf que $\phi(v_*)$ a remplacé $\phi(v)$. L'idée des deux autres manipulations est de trouver les changements de variables qui permettront successivement de faire apparaître $\phi(C_1^\omega(v, v_*))$ puis $\phi(C_2^\omega(v, v_*))$.

Expression 3.

Effectuons le changement de variables $(v, v_*) \mapsto (v', v'_*) = C^\omega(v, v_*)$. Le jacobien de cette transformation vaut 1, ce qui se vérifie par le calcul, ou plus simplement de façon géométrique : remarquons que la transformation conserve la norme du couple (v, v_*) (c'est la relation de conservation de l'énergie cinétique (A.7), et donc que la transformation est orthogonale, et donc son déterminant vaut 1 en valeur absolue (voir le cours de licence). Ainsi, $d\omega dv_* dv = d\omega dv'_* dv'$. En outre, d'après les relations (A.12) et (A.13) et la définition de B (voir (A.11)), on obtient $B(\omega, v - v_*) = B(\omega, v' - v'_*)$. Pour les autres termes, il faut pouvoir exprimer v et v_* en fonction de v' et v'_* , c'est-à-dire inverser la collision. Or il n'est pas difficile de voir que $C^{-1} = C$, et donc que $(v, v_*) = C(v', v'_*)$. Ainsi, (A.16) se transforme en

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v)Q(f) dv \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v' - v'_*) \left(f(v'_*)f(v') - f(C_2^\omega(v', v'_*))f(C_1^\omega(v', v'_*)) \right) \phi(C_1^\omega(v', v'_*)) d\omega dv'_* dv'. \end{aligned}$$

Pour comparer à (A.16), nous faisons un nouveau changement de notation : on enlève les primes ! Autrement dit, v'_* et v' sont à présent notées v_* et v . Il vient :

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v)Q(f) dv \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v_* - v) \left(f(v_*)f(v) - f(C_2^\omega(v, v_*))f(C_1^\omega(v, v_*)) \right) \phi(C_1^\omega(v, v_*)) d\omega dv_* dv. \end{aligned}$$

Enfin, après un réarrangement des termes, nous obtenons

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v) Q(f) dv \\ &= - \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v_* - v) \left(f(C_2^\omega(v, v_*)) f(C_1^\omega(v, v_*)) - f(v_*) f(v) \right) \phi(C_1^\omega(v, v_*)) d\omega dv_* dv, \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

ce qui n'est autre que (A.16) avec le signe moins et $\phi(C_1^\omega(v, v_*))$ à la place de $\phi(v)$.

Expression 4.

Il nous reste à faire apparaître $\phi(C_2^\omega(v, v_*))$, ce qui va se faire simplement par un nouveau changement de notation : partons de (A.18) et échangeons v et v_* . Nous trouvons

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v) Q(f) dv \\ &= - \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v_* - v) \left(f(C_2^\omega(v_*, v)) f(C_1^\omega(v_*, v)) - f(v) f(v_*) \right) \phi(C_1^\omega(v_*, v)) d\omega dv dv_*. \end{aligned}$$

Il suffit à présent d'utiliser les mêmes arguments que pour l'expression 2 pour obtenir

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v) Q(f) dv \\ &= - \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_*) \left(f(C_1^\omega(v, v_*)) f(C_2^\omega(v, v_*)) - f(v) f(v_*) \right) \phi(C_2^\omega(v, v_*) d\omega dv dv_*. \end{aligned}$$

Puis un dernier réarrangement donne

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v) Q(f) dv \\ &= - \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_*) \left(f(C_2^\omega(v, v_*)) f(C_1^\omega(v, v_*)) - f(v_*) f(v) \right) \phi(C_2^\omega(v, v_*)) d\omega dv_* dv \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

qui n'est autre que (A.16) avec le signe moins et $\phi(C_2^\omega(v, v_*))$ à la place de $\phi(v)$.

Il suffit alors de prendre la moyenne des 4 relations (A.16)–(A.19) pour obtenir la forme faible (A.14), ce qui conclut la démonstration. \square

Voyons à présent la propriété de conservation de l'opérateur de collision, qui est une conséquence de la conservation de la masse, impulsion, et énergie cinétique lors d'une collision entre deux molécules. Pour simplifier les expressions suivantes, nous utiliserons désormais la notation $\langle \phi \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v) dv$ pour toute fonction ϕ de v , à valeur scalaire, vectorielle, ou tensorielle.

Propriété A.3. *L'opérateur de collision de Boltzmann satisfait les relations suivantes, pour toute fonction f :*

$$\langle Q(f) \rangle = 0, \quad \langle v Q(f) \rangle = 0, \quad \langle \frac{1}{2} |v|^2 Q(f) \rangle = 0.$$

Démonstration. C'est une conséquence de la propriété A.2 et des lois de conservations microscopiques (A.6) et (A.7) : il suffit de choisir successivement $\phi(v) = 1$, v , puis $\frac{1}{2}|v|^2$ dans (A.14) pour obtenir le résultat. En effet, pour ces trois fonctions, on a la relation $\phi(v'_\star) + \phi(v') - \phi(v_\star) - \phi(v) = 0$: pour $\phi = 1$ c'est évident, et pour $\phi = v$ et $\phi = |v|^2$ cette relation n'est autre que (A.6) et (A.7). \square

A.4.2 Théorème H et convergence vers l'équilibre

Dissipation d'entropie. La deuxième propriété fondamentale de l'opérateur de collision est celle de dissipation d'entropie.

Propriété A.4. *Quelle que soit la fonction f positive, on a*

$$\langle Q(f) \ln f \rangle \leq 0.$$

Démonstration. Là encore, nous utilisons la forme faible (A.14) mais avec $\phi = \ln f$. Il vient

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \ln f Q(f) dv \\ &= \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_\star) (f(v'_\star) f(v') - f(v_\star) f(v)) \\ & \quad \times (\ln f(v_\star) + \ln f(v) - \ln f(v'_\star) - \ln f(v')) d\omega dv_\star dv \\ &= \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_\star) (f(v'_\star) f(v') - f(v_\star) f(v)) (\ln f(v_\star) f(v) - \ln f(v'_\star) f(v')) d\omega dv_\star dv, \end{aligned} \tag{A.20}$$

où l'on a utilisé la relation $\ln a + \ln b = \ln ab$. Il suffit ensuite de remarquer que la fonction \ln est croissante pour conclure que l'intégrande est négative, d'où le résultat. \square

Caractérisation de l'équilibre. Nous montrons ici que l'opérateur de Boltzmann satisfait bien l'hypothèse 9.3.

L'implication $1 \Rightarrow 2$ est évidente. Montrons ensuite l'implication $3 \Rightarrow 1$: en injectant $f = M[\rho, u, T]$ dans la définition de Q , on trouve que $Q(M[\rho, u, T]) = 0$ si le terme $M(v'_\star)M(v') - M(v_\star)M(v)$ est nul. Utilisons alors l'expression de M (voir (2.7)) pour obtenir

$$\begin{aligned} & M(v'_\star)M(v') - M(v_\star)M(v) \\ &= \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \left(\exp\left(-\frac{|v'_\star - u|^2 + |v' - u|^2}{2RT}\right) - \exp\left(-\frac{|v_\star - u|^2 + |v - u|^2}{2RT}\right) \right). \end{aligned}$$

Cette différence est nulle si, et seulement si, les arguments des deux exponentielles sont égaux, ce qui donne

$$|v'_\star - u|^2 + |v' - u|^2 = |v_\star - u|^2 + |v - u|^2.$$

En développant cette expression, trouve

$$|v'_\star|^2 + |v'|^2 - 2u \cdot (v'_\star + v') + 2|u|^2 = |v_\star|^2 + |v|^2 - 2u \cdot (v_\star + v) + 2|u|^2,$$

qui est nécessairement vérifiée, puisque v'_\star et v' vérifient les relations de conservation (A.6)-(A.7).

Il reste à montrer l'implication $2 \Rightarrow 3$, ce qui demande beaucoup plus d'astuce. D'après l'analyse faite dans la preuve de la proposition A.4, la relation $\langle Q(f) \ln f \rangle = 0$ implique $(f(v'_\star)f(v') - f(v_\star)f(v))(\ln f(v_\star)f(v) - \ln f(v'_\star)f(v')) = 0$ pour tout v, v_\star . La fonction \ln étant croissante, la relation précédente équivaut à $f(v'_\star)f(v') - f(v_\star)f(v) = 0$, ou, ce qui est plus utile, à $\ln f(v_\star) + \ln f(v) = \ln f(v'_\star) + \ln f(v')$. On voit donc que $\ln f$ est un invariant collisionnel. Jusqu'à présent, nous avons rencontré deux invariants collisionnels : les fonctions v et $|v|^2$, et il est facile de voir que la fonction constante 1 en est un autre. Il est possible de montrer que tous les autres invariants collisionnels ne sont que des combinaisons linéaires de ces trois là (voir le lemme A.3 ci-dessous), et donc que $\ln f(v)$ s'écrit nécessairement $\ln f(v) = a + b \cdot v + c|v|^2$, où a et c sont deux paramètres scalaires et b est un vecteur. Par conséquent, on trouve que $f(v) = \exp(a + b \cdot v + c|v|^2)$, ce qui peut facilement s'écrire sous la forme $f(v) = M[\rho, u, T](v)$ en posant $a = \ln \rho / (2\pi RT)^{3/2} - |u|^2 / RT$, $b = u / RT$, et $c = 1 / 2RT$.

Invariants collisionnels. Nous donnons ici une démonstration du théorème utilisé plus haut, en nous inspirant du livre de Boltzmann [2] et de notes de F. Golse [7].

Lemme A.3. *Soit une fonction ϕ invariant collisionnel, c'est-à-dire telle que*

$$\phi(v) + \phi(v_\star) = \phi(v') + \phi(v'_\star), \quad (\text{A.21})$$

pour tout v et v_\star de \mathbb{R}^3 et tout $\omega \in S^2$, avec $(v', v'_\star) = C^\omega(v, v_\star)$ définie par (A.15). Alors, il existe deux constantes réelles a et c et un vecteur constant b tels que $\phi(v) = a + b \cdot v + c|v|^2/2$.

Démonstration. Considérons deux vitesses w et w_\star telles que

$$w + w_\star = v + v_\star \quad \text{et} \quad |v|^2 + |v_\star|^2 = |w|^2 + |w_\star|^2. \quad (\text{A.22})$$

Alors l'analyse faite pour obtenir (A.9) montre qu'il existe un vecteur unitaire Ω tel que $(w, w_\star) = C^\Omega(v, v_\star)$. L'hypothèse du lemme implique $\phi(v) + \phi(v_\star) = \phi(w) + \phi(w_\star)$, ce qui est donc vrai pour tout couple (w, w_\star) vérifiant (A.22). Il est alors facile de montrer qu'il existe une fonction T telle que $\phi(v) + \phi(v_\star) = T(v + v_\star, |v|^2 + |v_\star|^2)$ pour tout v et v_\star . Commençons par définir T : soient $c \in \mathbb{R}^3$ et $r > 0$, et considérons v et v_\star tels que $v + v_\star = c$ et $|v|^2 + |v_\star|^2 = r$, pour ensuite poser $T(c, r) := \phi(v) + \phi(v_\star)$. Cela définit bien T de façon unique, car si (w, w_\star) est un autre couple tel que $w + w_\star = c$ et $|w|^2 + |w_\star|^2 = r$ alors (w, w_\star) vérifie (A.22), et donc $\phi(v) + \phi(v_\star) = \phi(w) + \phi(w_\star)$, ce qui implique que $T(c, r)$ prend la même valeur que l'on utilise (v, v_\star) ou (w, w_\star) . Raisonnons à présent en sens inverse pour conclure la démonstration : prenons un couple quelconque (v, v_\star) et posons $c := v + v_\star$ et $r := |v|^2 + |v_\star|^2$. Par définition de T , on a $\phi(v) + \phi(v_\star) = T(c, r) = T(v + v_\star, |v|^2 + |v_\star|^2)$, et cela est vrai quel que soit (v, v_\star) .

Pour simplifier la suite, notons à présent x pour v et y pour v_\star . Nous rappelons le résultat obtenu jusqu'ici : il existe une fonction T telle que

$$\phi(x) + \phi(y) = T(x + y, |x|^2 + |y|^2). \quad (\text{A.23})$$

La suite de la démonstration consiste à faire des dérivations successives de cette relation afin de montrer que la hessienne de ϕ est constante et diagonale. Dans la suite, nous noterons $\alpha \in \mathbb{R}^3$ la première variable de T et $\beta \in \mathbb{R}$ sa variable scalaire. Nous noterons aussi $\partial_i T$ sa dérivée partielle par rapport à α_i , et ∂_β sa dérivée partielle par rapport à β . Enfin, nous noterons $\partial_i \phi$ la dérivée partielle de ϕ par rapport à sa i^e variable.

Fixons un entier i compris entre 1 et 3, et commençons par dériver (A.23) par rapport à x_i : il vient

$$\partial_i \phi(x) = \partial_i T + 2x_i \partial_\beta T, \quad (\text{A.24})$$

où l'on omet les arguments de T quand il n'y a pas d'ambiguïté. Dérivons maintenant (A.23) par rapport à y_i : il vient

$$\partial_i \phi(y) = \partial_i T + 2y_i \partial_\beta T. \quad (\text{A.25})$$

Nous éliminons à présent le terme $\partial_i T$ des deux relations précédentes en retranchant la deuxième à la première :

$$\partial_i \phi(x) - \partial_i \phi(y) = 2(x_i - y_i) \partial_\beta T. \quad (\text{A.26})$$

Nous pouvons évidemment refaire ces trois manipulations avec un autre entier j différent de i pour obtenir

$$\partial_j \phi(x) - \partial_j \phi(y) = 2(x_j - y_j) \partial_\beta T. \quad (\text{A.27})$$

On peut maintenant éliminer le terme $\partial_\beta T$ en calculant $(x_j - y_j)(\text{A.26}) - (x_i - y_i)(\text{A.27})$ pour obtenir

$$(x_j - y_j)(\partial_i \phi(x) - \partial_i \phi(y)) = (x_i - y_i)(\partial_j \phi(x) - \partial_j \phi(y)). \quad (\text{A.28})$$

Avec cette relation, il est possible de montrer que $\partial_i \partial_j \phi = 0$. Il suffit pour cela de dériver une première fois (A.28) par rapport à x_i , ce qui donne

$$(x_j - y_j) \partial_i^2 \phi(x) = (\partial_j \phi(x) - \partial_j \phi(y)) + (x_i - y_i) \partial_i \partial_j \phi(x), \quad (\text{A.29})$$

puis de dériver cette dernière relation par rapport à y_i pour trouver

$$0 = -\partial_i \partial_j \phi(y) - \partial_i \partial_j \phi(x). \quad (\text{A.30})$$

Ceci montre que $\partial_i \partial_j \phi(y) = -\partial_i \partial_j \phi(x)$ pour tout x et tout y : cela n'est possible que si $\partial_i \partial_j \phi \equiv 0$. Ce raisonnement peut se faire pour n'importe quels i et j différents, d'où la relation

$$\partial_i \partial_j \phi \equiv 0, \quad \text{pour tout } i \neq j. \quad (\text{A.31})$$

Il reste à obtenir des informations sur $\partial_i^2 \phi$: pour cela, revenons à la relation (A.29) qui s'écrit, compte tenu de (A.31),

$$(x_j - y_j) \partial_i^2 \phi(x) = \partial_j \phi(x) - \partial_j \phi(y). \quad (\text{A.32})$$

Dérivons cette relation par rapport à y_j pour trouver

$$-\partial_i^2 \phi(x) = -\partial_j^2 \phi(y). \quad (\text{A.33})$$

Cela implique que $\partial_i^2 \phi$ vérifie nécessairement

$$\partial_i^2 \phi(x) = c \quad (\text{A.34})$$

où c est une constante indépendant de x et de i . On peut enfin rassembler (A.31) et (A.34) pour obtenir que la hessienne de ϕ vaut $H_\phi(x) = cI_3$.

Il suffit alors d'utiliser la formule de Taylor avec reste intégral $\phi(x) = \phi(0) + \nabla\phi(0) \cdot x + \int_0^1 x^T H_\phi(x)x(1-t) dt$ pour conclure que $\phi(x) = a + b \cdot x + c|x|^2/2$.

□

Remarque A.1. Cette démonstration suppose ϕ de classe C^2 , mais cela n'est pas du tout nécessaire : elle est en fait valable pour toute fonction au moins localement intégrable.

Bibliographie

- [1] G.A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford Science Publications, 1994.
- [2] L. Boltzmann. *Lectures on gas theory*. Dover, 1964.
- [3] I. D. Boyd and T. E. Schwartzentruber. *Nonequilibrium gas dynamics and molecular simulation*. Cambridge Aerospace Series. Cambridge University Press, Cambridge, 2017.
- [4] D. H. Davis. Monte carlo calculation of molecular flow rates through a cylindrical elbow and pipes of other shapes. *Journal of Applied Physics*, 31(7) :1169–1176, 1960.
- [5] G. Dimarco and L. Pareschi. Numerical methods for kinetic equations. *Acta Numer.*, 23 :369–520, 2014.
- [6] F. Golse. Mean field kinetic equations.
www.mathpolytechnique.fr/~golse/M2/PolyKinetic.pdf.
- [7] F. Golse. The Boltzmann equation and its hydrodynamic limits. In CEA Université de Franche-Comté, CNRS, editor, *École thématique : les modèles cinétiques non linéaires et leurs limites fluides*, Besançon 21-23 avril 1997.
- [8] J. C. Maxwell. On stresses in rarefied gases arising from inequalities of temperature. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, 170 :231–256, 1879.
- [9] L. Mieussens. A survey of deterministic solvers for rarefied flows (invited). *AIP Conference Proceedings*, 1628(1) :943–951, 2014.

Crédits images

— couverture : cette image est tirée de la thèse de Guillaume Dechristé
<https://www.theses.fr/185777864>