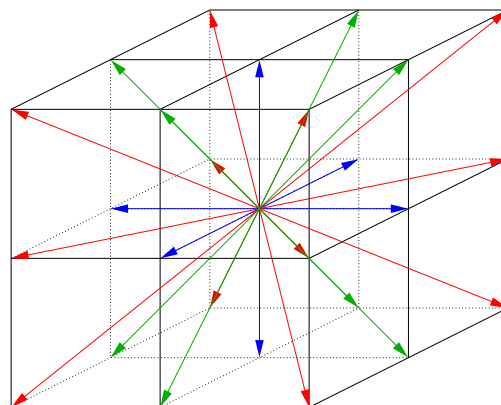
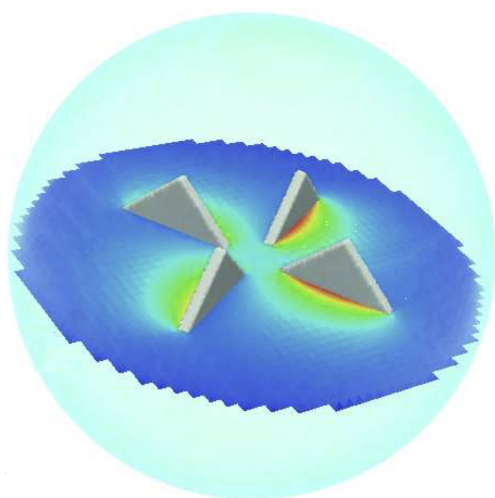


Transport de particules : modèles, simulations, et applications

Notes de cours
(version provisoire du 4 avril 2022)



Luc Mieussens

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

Table des matières

1	Théorie cinétique des gaz	7
1	Descriptions microscopique / macroscopique d'un gaz	7
2	Description cinétique	10
3	Calcul cinétique de la pression	17
4	Flux	19
5	Propriétés du gaz à l'équilibre	23
6	Flux à la paroi	26
7	Interaction gaz-paroi solide	30
8	Calculs en régime moléculaire libre	33
9	Modèles de collisions entre molécules pour le régime raréfié	37
10	Analyse asymptotique	43
11	Simulation numérique d'un écoulement raréfié	52
12	Exercices	58
13	TP : onde de choc dans un gaz	59
2	Application aux écoulements incompressibles : la méthode "Boltzmann sur réseau"	63
1	Introduction	63
2	Équations de Stokes	64
3	Régime bas Mach : de Boltzmann à Stokes	65
4	Discrétisation en vitesse : le modèle D2Q9	75
5	Discrétisation en temps et espace : méthode de Boltzmann sur réseau	77
6	Mise en oeuvre	84
7	Extensions	85
8	TP : initiation à la méthode Boltzmann sur réseau	86
3	Transfert radiatif	95
1	Introduction	95
2	Modélisation cinétique de l'énergie de radiation	96
3	Radiation du corps noir	99
4	Équation de transport	102
5	Couplage avec l'évolution de la température du matériau	105

6	Transfert radiatif dans un matériau opaque : limite de diffusion	106
7	Exercices	108
4	Modélisation des sprays	111
1	Introduction	111
2	Description des particules	112
3	Modèle cinétique	114
4	Effet des particules sur le fluide	116
5	Modèles macroscopiques	117
6	Un exemple d'application : modélisation des embruns océaniques	119
7	TP : simulation d'un spray	119
5	Annexe : compléments	123
1	Notations : opérateurs différentiels et vectoriels	123
2	Intégrales gaussiennes	124
3	Dérivées de la maxwellienne	129
4	L'opérateur de collision de Boltzmann	130
5	La formule du transport de Reynolds	137
	Bibliographie	141

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”.

Théorie cinétique des gaz

Sommaire

1	Descriptions microscopique / macroscopique d'un gaz	7
2	Description cinétique	10
3	Calcul cinétique de la pression	17
4	Flux	19
5	Propriétés du gaz à l'équilibre	23
6	Flux à la paroi	26
7	Interaction gaz-paroi solide	30
8	Calculs en régime moléculaire libre	33
9	Modèles de collisions entre molécules pour le régime raréfié . .	37
10	Analyse asymptotique	43
11	Simulation numérique d'un écoulement raréfié	52
12	Exercices	58
13	TP : onde de choc dans un gaz	59

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 utilisé 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 ns¹. 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} .

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.

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} .

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'annexe 1 page 123.

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

$$\rho(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} f(t, x, v) dv. \quad (1.4)$$

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 :

$$\rho(t, x)u(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} v f(t, x, v) dv, \quad (1.5)$$

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

$$u(t, x) = \frac{1}{\rho(t, x)} \int_{\mathbb{R}^3} v f(t, x, v) dv. \quad (1.6)$$

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 :

$$E(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2}|v|^2 f(t, x, v) dv. \quad (1.7)$$

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'une 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

$$E_{th}(t, x) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2}|v - u|^2 f(t, x, v) dv. \quad (1.8)$$

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 :

$$T(t, x) = \frac{1}{\frac{3}{2}\rho(t, x)R} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2}|v - u|^2 f(t, x, v) dv. \quad (1.9)$$

Remarque 1.2. En mathématiques, une intégrale du type $\int_{\mathbb{R}^n} v^k g(v) dv$ 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 (1.4)–(1.7) sont respectivement des moments d'ordre 0, 1, et 2 de f .

Exercice 1.1. 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 (1.4)–(1.7). 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 RT . Sa notation et sa définition sont :

$$M[\rho, u, T](v) = \frac{\rho}{(2\pi RT)^{3/2}} \exp\left(-\frac{|v - u|^2}{2RT}\right). \quad (1.10)$$

Cette fonction de distribution est appelée distribution maxwellienne (voir figure 1.1). Ce n'est rien d'autre qu'une distribution gaussienne (aussi appelée loi normale) centrée sur u et d'écart type \sqrt{RT} .

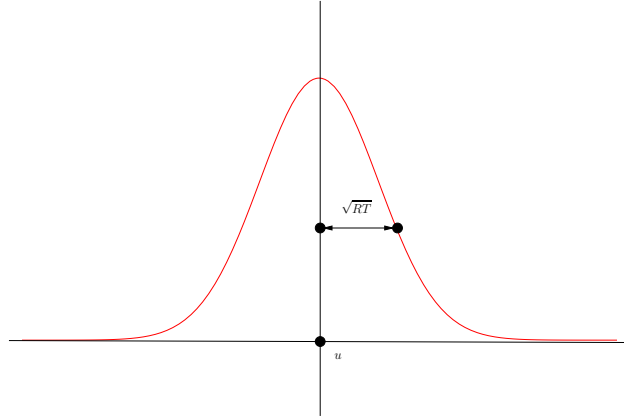


FIGURE 1.1 – Maxwellienne $M[\rho, u, T]$ (vue 1D).

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 1.2. 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 annexes 2.1 page 124 et 2.2 page 125.

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 la *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

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L}. \quad (1.11)$$

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 il 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 équipant de nombreux appareils électroniques (micro-actionneurs, micro-gyroscopes, micro-senseurs, etc.), voir figure 1.3.

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 1.4.

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,

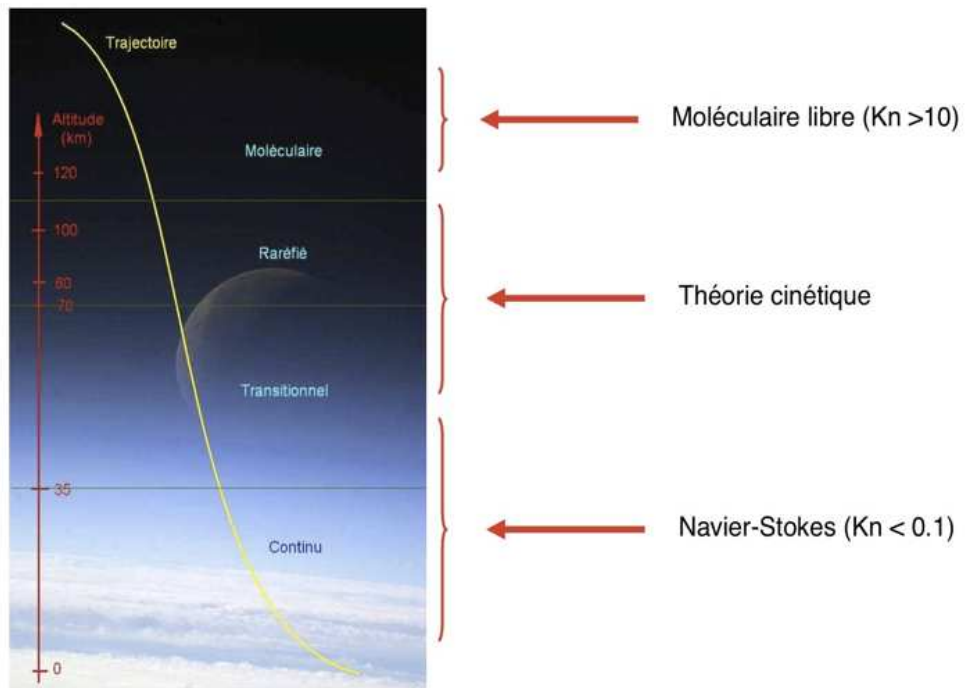


FIGURE 1.2 – Trajectoire typique lors d’une rentrée atmosphérique, régimes d’écoulements en fonction de l’altitude, et modèles correspondants.

flux de chaleur, etc.), et de prédire l’évolution d’un écoulement.

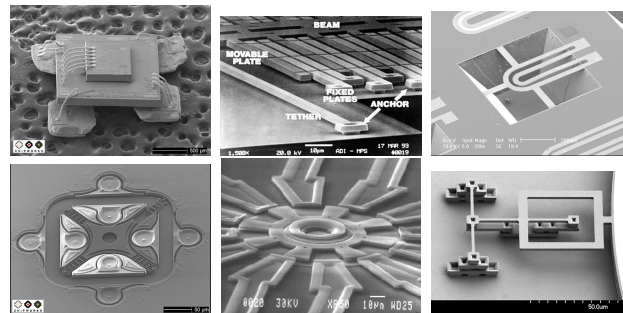


FIGURE 1.3 – Quelques MEMS : Gyromètre, accéléromètre, inducteur, gyroscope, rotor, charnière(de gauche à droite et de haut en bas)

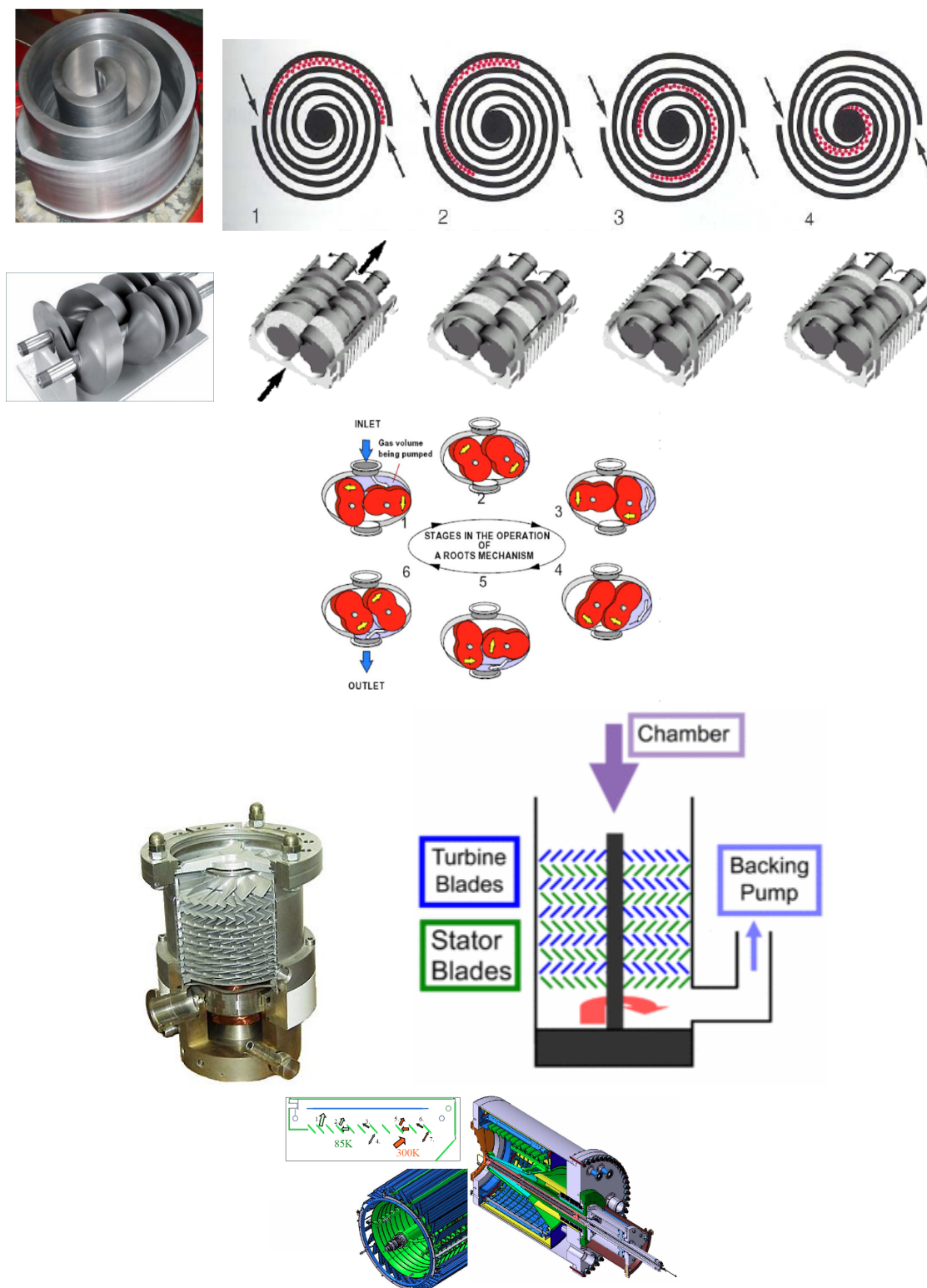


FIGURE 1.4 – Quelques pompes à vide : à spirale, à vis, à lobes, turbomoléculaire, cryopompe.

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 1.5) ; le gaz exerçant une force $F_{\text{gaz} \rightarrow dS}$ sur dS , la pression et cette force sont reliées par la relation

$$F_{\text{gaz} \rightarrow dS} = -pndS. \quad (1.12)$$

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 $dx = (-v \cdot n)dtdS$.

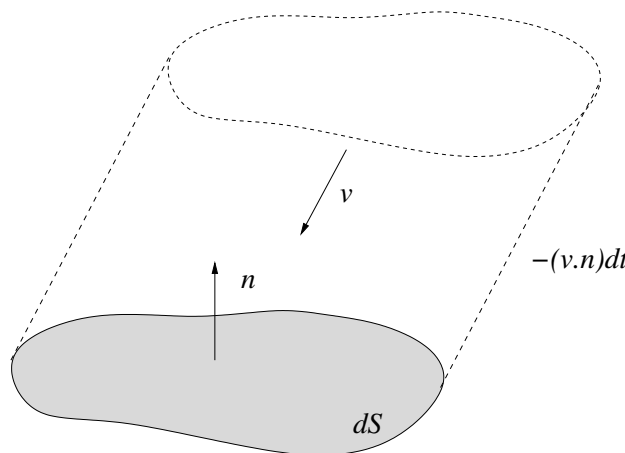


FIGURE 1.5 – Cylindre contenant les particules de vitesse v qui impactent dS pendant dt .

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 $\tilde{f}dx dv$ molécules de ce type dans le cylindre². 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

$$\mathcal{I}_{inc} = \left(\int_{v \cdot n < 0} v(-v \cdot n)f dv \right) dt dS. \quad (1.13)$$

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

$$\mathcal{I}_{ref} = \left(\int_{v \cdot n > 0} v(v \cdot n)f(t, x, v) dv \right) dt dS. \quad (1.14)$$

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

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

Les relations (1.13) et (1.14) donnent donc

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

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

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

2. 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.

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

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

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

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

En comparant avec (1.12), 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 1.3. 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).

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 1.6). 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 1.6). 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

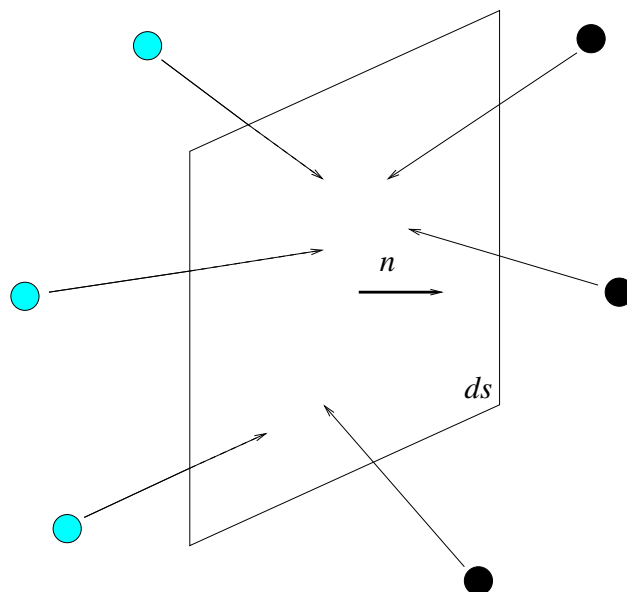


FIGURE 1.6 – Flux de masse à travers une surface virtuelle

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

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

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 (1.5), on trouve aussi l'expression

$$\Phi_m = \rho u \cdot n. \quad (1.15)$$

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 1.4. Notons que le choix arbitraire de calculer la 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 1.15). 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

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

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

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

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

$$\Sigma(f) = \int_{\mathbb{R}^3} (v - u) \otimes (v - u) f(t, x, v) dv. \quad (1.16)$$

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 (1.9), 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 1.5. Le choix d'avoir défini $\Sigma(f)$ de façon à avoir $F_{\text{gaz} \rightarrow dS} = -\Sigma ndS$ (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

$$\Phi_{th} = \frac{\mathcal{E}_G - \mathcal{E}_D}{dt dS} = \left(\int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2} |v - u|^2 (v - u) f(t, x, v) dv \right) \cdot n. \quad (1.17)$$

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 (1.17) 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 .

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 (1.6)). 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 (1.16). 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 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

$$\Sigma(M) = pI_3, \tag{1.18}$$

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

5.3 Flux de chaleur

Le calcul est ici très rapide : d'après (1.43), on a

$$q(M) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{2}(v - u)|v - u|^2 M[\rho, u, T] dv = 0, \quad (1.19)$$

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

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 1.5). 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 1.7.

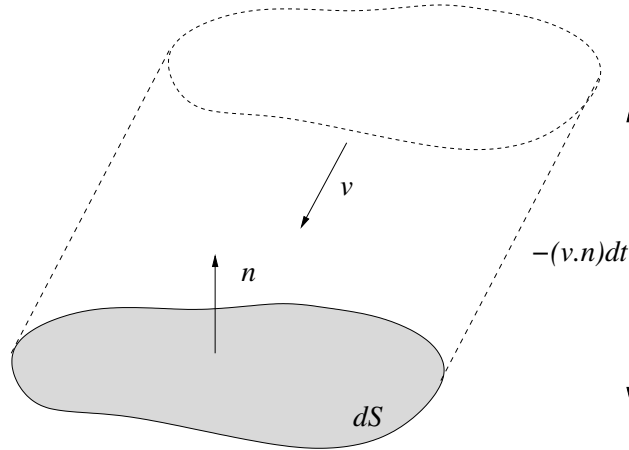


FIGURE 1.7 – Cylindre contenant les particules qui impactent dS pendant dt .

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

$$\mathcal{M}_{inc} = \left(\int_{v \cdot n < 0} (-v \cdot n) f_{inc}(t, x, v) dv \right) dt dS. \quad (1.20)$$

On peut calculer de même la masse des particules réfléchies :

$$\mathcal{M}_{ref} = \left(\int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) f_{ref}(t, x, v) dv \right) dt dS. \quad (1.21)$$

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 1.5.

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

$$\mathcal{I}_{inc} = \left(\int_{v \cdot n < 0} v(-v \cdot n) f_{inc}(t, x, v) dv \right) dt dS. \quad (1.22)$$

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

$$\mathcal{I}_{ref} = \left(\int_{v \cdot n > 0} v(v \cdot n) f_{ref}(t, x, v) dv \right) dt dS. \quad (1.23)$$

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

$$p = \int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n)^2 f_{ref}(t, x, v) dv + \int_{v \cdot n < 0} (v \cdot n)^2 f_{inc}(t, x, v) dv. \quad (1.24)$$

De même, la contrainte tangentielle dans la direction τ est

$$\sigma = \int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n)(v \cdot \tau) f_{ref}(t, x, v) dv + \int_{v \cdot n < 0} (v \cdot n)(v \cdot \tau) f_{inc}(t, x, v) dv. \quad (1.25)$$

Exercice 1.3. Montrer que la force exercée par le gaz sur la paroi peut aussi s'écrire $F_{gaz \rightarrow dS} = -\Sigma n dS$, 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

$$\begin{aligned} \Phi_{energie} &= \frac{\mathcal{E}_{ref} - \mathcal{E}_{inc}}{dt dS} \\ &= \int_{v \cdot n > 0} \frac{1}{2} |v|^2 (v \cdot n) f_{ref} dv + \int_{v \cdot n < 0} \frac{1}{2} |v|^2 (-v \cdot n) f_{inc} dv. \end{aligned} \tag{1.26}$$

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.

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 [14], 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 réfléchié dans la direction symétrique par rapport à la normale à la paroi, avec la même norme de vitesse (voir figure 1.8). Cette réflexion se traduit ainsi pour la fonction de

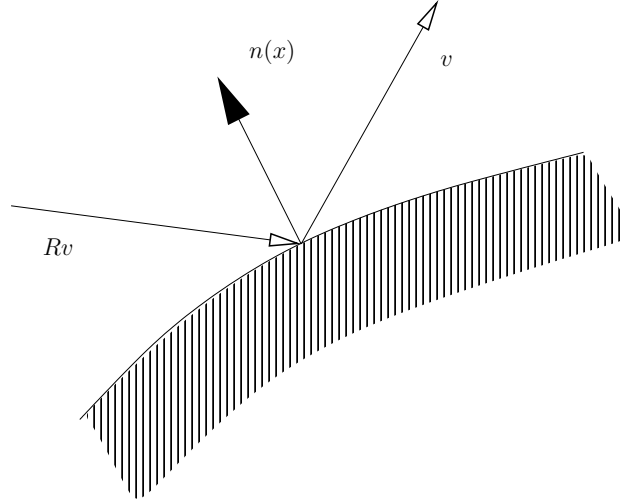


FIGURE 1.8 – Réflexion spéculaire

distribution : la distribution des molécules réfléchies est égale à la distribution des molécules incidentes, et l'on a pour tout v tel que $v \cdot n > 0$:

$$f_{ref}(t, x, v) = f_{inc}(t, x, Rv), \quad \text{avec } Rv = v - 2(v \cdot n)n, \quad (1.27)$$

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.

Propriété 1.1. *Si f_{inc} et f_{ref} sont liées par la condition de réflexion spéculaire (1.27), alors le flux de masse Φ_m (défini par (1.15)) 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 (1.27) 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 1.4). 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

$$f_{ref}(t, x, v) = M[\rho_{ref}, 0, T_w](v), \quad (1.28)$$

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

$$\rho_{ref} = \frac{\int_{v \cdot n < 0} (-v \cdot n) f_{inc}(t, x, v) dv}{\int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) M[1, 0, T_w] dv}. \quad (1.29)$$

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 1.6). 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

$$f_{ref}(t, x, v) = (1 - \alpha) f_{inc}(t, x, Rv) + \alpha M[\rho_{ref}, 0, T_w](v), \quad (1.30)$$

où α est un paramètre entre 0 et 1, parfois appelé *coefficient d'accommodation*, qui dépend du type de paroi considéré. La définition (1.29) 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 1.4. Montrer que dans le cas de la réflexion spéculaire, le flux d'énergie à la paroi défini par (1.26) est nul.

Exercice 1.5. 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 (1.30). Autrement dit, le modèle de réflexion avec accommodation partielle est bien compatible avec un gaz à l'équilibre avec la paroi.

Exercice 1.6. 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 1.7. Formuler une extension des conditions de réflexion précédentes dans le cas où la paroi solide est animée d'une vitesse u_w non nulle.

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 1.9).

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 (1.24)) que la pression exercée par le gaz à la paroi vaut

$$p = \int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n)^2 f_{ref} dv + \int_{v \cdot n < 0} (v \cdot n)^2 f_{inc} dv. \quad (1.31)$$

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

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

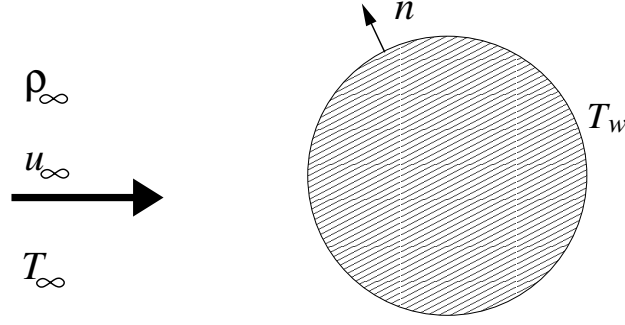


FIGURE 1.9 – Satellite en mouvement et gaz environnant

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 (1.28)–(1.29), 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

$$\rho_{ref} = \frac{\int_{v \cdot n < 0} (-v \cdot n) f_{inc}(t, x, v) dv}{\int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) M[1, 0, T_w] dv}. \quad (1.32)$$

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 pourrons ensuite calculer les flux d'impulsion incident et réfléchi nécessaires à (1.31). 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 (1.32) est le flux de masse incident

$$\Phi_{m,inc} = \int_{v \cdot n < 0} (-v \cdot n) f_{inc} dv = \int_{v \cdot n < 0} (-v \cdot n) M[\rho_\infty, u_\infty, T_\infty] dv. \quad (1.33)$$

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 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

$$\Phi_{m,inc} = \int_{-\infty}^{-u_{\infty,n}} -(c + u_{\infty,n}) \frac{\rho_\infty}{\sqrt{2\pi RT_\infty}} \exp\left(-\frac{c^2}{2RT_\infty}\right) dc, \quad (1.34)$$

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 (1.34) 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 (1.34), 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 :

$$\Phi_{m,inc} = \rho_\infty \sqrt{\frac{RT_\infty}{2\pi}} \left(e^{-s_n^2} + \sqrt{\pi} s_n (1 + \operatorname{erf}(s_n)) \right). \quad (1.35)$$

Flux de masse réfléchi Le dénominateur de (1.32) 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

$$\int_{v \cdot n > 0} (v \cdot n) M[1, 0, T_w] dv = \sqrt{\frac{RT_w}{2\pi}}. \quad (1.36)$$

Densité de masse des molécules réfléchies Finalement, en injectant (1.35) et (1.36) dans (1.32), on trouve donc l'expression de la densité de masse des molécules réfléchies

$$\rho_{ref} = \rho_{\infty} \sqrt{\frac{T_{\infty}}{T_w}} \left(e^{-s_n^2} + \sqrt{\pi} s_n (1 + \operatorname{erf}(s_n)) \right). \quad (1.37)$$

8.2 Calcul de la pression

Nous pouvons à présent passer au calcul de la pression : les deux intégrales de la formule (1.31) 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 (1.37) 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

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

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 :

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

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 (1.31) 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 1.8. Calculer de la même façon le cisaillement à la paroi dans une direction t_1 , ainsi que le flux d'énergie.

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 $dv dx$ 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 $\phi'(0) = \partial_t f + v \cdot \nabla_x f$ ³. 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 4 page 130 pour des détails.

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

$$(\partial_t f + v \cdot \nabla_x f)(t, x, v) = Q(f(t, x, \cdot))(v). \quad (1.38)$$

3. 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.

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

$$\langle Q(f) \rangle = 0, \quad \langle vQ(f) \rangle = 0, \quad \langle \frac{1}{2}|v|^2 Q(f) \rangle = 0. \quad (1.39)$$

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

$$\langle Q(f) \ln f \rangle \leq 0. \quad (1.40)$$

La troisième est une propriété d'équilibre.

Hypothèse 1.3.

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

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 1.1 page 39 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 1.2. *Si f est solution de l'équation de Boltzmann homogène en espace :*

$$\partial_t f = Q(f), \quad (1.41)$$

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 (1.41) par 1, v , et $\frac{1}{2}|v|^2$, intégrons en vitesse, et utilisons (1.39) 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 1.3. *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 (1.38) par 1, v , $\frac{1}{2}|v|^2$ et d'intégrer par rapport à v : la propriété de conservation (1.39) 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 1.4. *les flux de quantité de mouvement et d'énergie se décomposent en*

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

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

$$\Sigma(f) = \langle (v - u) \otimes (v - u) f \rangle \quad (1.42)$$

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

$$q(f) = \langle \frac{1}{2}(v - u)|v - u|^2 f \rangle \quad (1.43)$$

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

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

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.

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla \cdot \rho u &= 0, \\ \partial_t \rho u + \nabla \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla \cdot \Sigma(f) &= 0, \\ \partial_t E + \nabla \cdot (Eu + \Sigma(f)u + q(f)) &= 0.\end{aligned}\tag{1.44}$$

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 1.2 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

$$\partial_t f = Q(f).\tag{1.45}$$

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

$$\begin{aligned}\partial_t H(f) &= \langle (1 + \ln f) \partial_t f \rangle \\ &= \langle Q(f)(1 + \ln f) \rangle = \langle Q(f) \ln f \rangle \quad \text{d'après (1.39),} \\ &\leq 0,\end{aligned}\tag{1.46}$$

d'après (1.40). 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 1.10) à la fonction $\phi(r) = r \ln r$ (avec $a = M[\rho, u, T]$ et $b = f$) pour obtenir la minoration suivante :

$$\langle (1 + \ln M[\rho, u, T])(f - M[\rho, u, T]) \rangle \leq H(f) - H(M[\rho, u, T]).\tag{1.47}$$

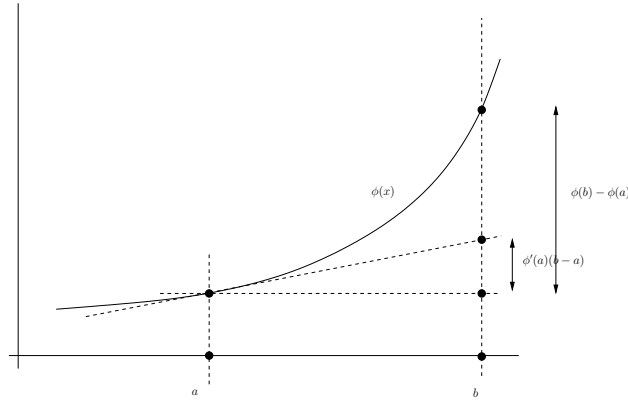


FIGURE 1.10 – inégalité de convexité $\phi'(a)(b-a) \leq \phi(b) - \phi(a)$ pour la fonction convexe et dérivable ϕ

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

$$\begin{aligned}
 & \langle (1 + \ln M[\rho, u, T])(f - M[\rho, u, T]) \rangle \\
 &= \langle (a + b \cdot v + c|v|^2)(f - M[\rho, u, T]) \rangle \\
 &= a \langle f - M[\rho, u, T] \rangle + b \cdot \langle v(f - M[\rho, u, T]) \rangle + c \langle |v|^2(f - M[\rho, u, T]) \rangle \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{1.48}$$

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 (1.46) 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 1.3 : 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 (1.4)–(1.9).

On obtient ainsi l'opérateur de relaxation proposé par Bathnagar, Gross et Krook (et indépendamment par Welander), et appelé opérateur BGK, qui s'écrit

$$Q_{BGK}(f) = \frac{1}{\tau}(M[\rho, u, T] - f), \quad (1.49)$$

et le modèle BGK complet s'écrit

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\tau}(M[\rho, u, T] - f). \quad (1.50)$$

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 (1.39). Pour la propriété de dissipation d'entropie (1.40), on peut à nouveau utiliser l'inégalité de convexité (1.47) 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.

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 (1.50) 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 (1.10) avec $R = 1$. L'équation BGK (1.50) 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

$$\partial_{t'} f' + v' \nabla_{x'} f' = \frac{t_*}{\tau_*} \frac{1}{\tau'} (M'[\rho', u', T'] - f'). \quad (1.51)$$

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 :

$$\lambda = v_* \tau_*. \quad (1.52)$$

Nous pouvons alors réécrire le rapport t_*/τ apparaissant dans (1.51) 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

$$\text{Kn} = \frac{\lambda}{L}, \quad (1.53)$$

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 (1.51), 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 :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon \tau} (M[\rho, u, T] - f), \quad (1.54)$$

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

$$M[\rho, u, T] = \frac{\rho}{(2\pi T)^{d/2}} \exp\left(-\frac{|v-u|^2}{2T}\right), \quad (1.55)$$

$$(\rho, \rho u, E) = \langle (1, v, \frac{1}{2}|v|^2) f dv \rangle, \quad (1.56)$$

$$E = \frac{1}{2}\rho|u|^2 + \frac{d}{2}\rho T. \quad (1.57)$$

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 (1.54) implique

$$f = M[\rho, u, T] + \varepsilon \tau (\partial_t f + v \cdot \nabla_x f). \quad (1.58)$$

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'évident⁴), alors (1.58) implique

$$f = M[\rho, u, T] + O(\varepsilon). \quad (1.59)$$

Ensuite, rappelons les lois de conservation (1.44) que vérifient les moments de f :

$$\begin{aligned} \partial_t \rho + \nabla_x \cdot \rho u &= 0, \\ \partial_t \rho u + \nabla_x \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla_x \cdot \Sigma(f) &= 0, \\ \partial_t E + \nabla_x \cdot (Eu + \Sigma(f)u + q(f)) &= 0. \end{aligned} \quad (1.60)$$

La relation (1.59) 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 (1.18) et (1.19) du tenseur des contraintes et du flux de chaleur de la maxwellienne pour obtenir

$$\Sigma(f) = pI_d + O(\varepsilon), \quad (1.61)$$

$$q(f) = O(\varepsilon), \quad (1.62)$$

4. 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*.

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 (1.60) qui s'écrivent maintenant

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla_x \cdot \rho u &= 0, \\ \partial_t \rho u + \nabla_x \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla_x p &= O(\varepsilon), \\ \partial_t E + \nabla_x \cdot ((E + p)u) &= O(\varepsilon).\end{aligned}\tag{1.63}$$

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

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + u \cdot \nabla_x \rho + \rho \nabla_x \cdot u &= 0, \\ \partial_t u + (u \cdot \nabla_x)u + \frac{1}{\rho} \nabla_x p &= O(\varepsilon), \\ \partial_t T + u \cdot \nabla_x T + \frac{2}{d} T \nabla_x \cdot u &= O(\varepsilon).\end{aligned}\tag{1.64}$$

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 (1.63) 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 (1.63) 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 (1.63), 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 calculs⁵.

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 :

$$f = M[\rho, u, T] + \varepsilon g. \quad (1.65)$$

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

$$\Sigma(f) = pI_d + \varepsilon \Sigma(g), \quad (1.66)$$

$$q(f) = \varepsilon q(g). \quad (1.67)$$

Il nous faut donc maintenant approcher $\Sigma(g)$ et $q(g)$ à $O(\varepsilon)$ près au moins. Pour cela, revenons à l'équation (1.54) que nous écrivons en utilisant la décomposition (1.65). 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

$$g = -\tau(\partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T]) + O(\varepsilon). \quad (1.68)$$

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, 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 (1.68). Nous avons

$$\Sigma(g) = -\tau \langle (v - u) \otimes (v - u) (\partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T]) \rangle + O(\varepsilon), \quad (1.69)$$

$$q(g) = -\tau \langle \frac{1}{2} (v - u) |v - u|^2 (\partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T]) \rangle + O(\varepsilon). \quad (1.70)$$

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

$$\begin{aligned} &\partial_t M[\rho, u, T] + v \cdot \nabla_x M[\rho, u, T] \\ &= \left(\frac{\partial_t \rho + v \cdot \nabla_x \rho}{\rho} + \frac{(v - u) \cdot (\partial_t u + (\nabla_x u) v)}{T} + \frac{(\frac{|v-u|^2}{2T} - \frac{d}{2})(\partial_t T + v \cdot \nabla_x T)}{T} \right) M[\rho, u, T]. \end{aligned} \quad (1.71)$$

5. 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.

Il est possible d'injecter cette relation dans (1.69) et (1.70), 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 (1.64)), 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 (1.71) 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 :

$$V = \frac{v - u}{\sqrt{T}}, \quad A(V) = \left(\frac{1}{2} |V|^2 - \frac{d + 2}{2} \right) V, \quad B(V) = V \otimes V - \frac{1}{d} |V|^2 I_d \quad (1.72)$$

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

$$M[\rho, u, T](v) = \frac{\rho}{T^{\frac{d}{2}}} M_0(V), \quad \text{où} \quad M_0(V) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} \exp\left(-\frac{|V|^2}{2}\right). \quad (1.73)$$

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 (1.69) et du flux de chaleur (1.70). 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 2.3 et 2.4 pour les calculs de ces moments, qui permettent d'aboutir au résultat suivant :

$$\Sigma(g) = -\tau\rho T \left(\nabla_x u + (\nabla_x u)^T - \frac{2}{d} \nabla_x \cdot u I_d \right) + O(\varepsilon), \quad (1.74)$$

$$q(g) = -\tau\rho T \frac{d+2}{2} \nabla_x T + O(\varepsilon). \quad (1.75)$$

En revenant aux décompositions (1.66)-(1.67), 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

$$\Sigma(f) = pI_d + \sigma + O(\varepsilon^2), \quad q(g) = q + O(\varepsilon^2), \quad (1.76)$$

avec

$$\begin{aligned} \sigma &= -\varepsilon\tau\rho T \left(\nabla_x u + (\nabla_x u)^T - \frac{2}{d} \nabla_x \cdot u I_d \right), \\ q &= -\varepsilon\tau\rho T \frac{d+2}{2} \nabla_x T. \end{aligned} \quad (1.77)$$

Revenons à présent aux lois de conservation (1.60) : en utilisant (1.76)–(1.77), on trouve

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla_x \cdot \rho u &= 0, \\ \partial_t \rho u + \nabla_x \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla_x p &= -\nabla \cdot \sigma + O(\varepsilon^2), \\ \partial_t E + \nabla_x \cdot (E + p)u &= -\nabla_x \cdot q - \nabla_x \cdot (\sigma u) + O(\varepsilon^2).\end{aligned}\tag{1.78}$$

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 (1.78), avec

$$\sigma = -\tau p (\nabla_x u + (\nabla_x u)^T - \frac{2}{d} \nabla_x \cdot u I_d) \quad \text{et} \quad q = -\tau p R \frac{d+2}{2} \nabla_x T,\tag{1.79}$$

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

$$\mu_{BGK} = \tau p \quad \text{et} \quad \kappa_{BGK} = \tau p R \frac{d+2}{2},\tag{1.80}$$

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 1.6. Notre analyse nous montre aussi que les coefficients de transport, en variables adimensionnées, sont du même ordre que le nombre de Knudsen (voir (1.77)).

Remarque 1.7. 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 1.8. Le modèle BGK présente un défaut notable : il conduit à un *nombre de Prandtl* incorrect. Ce nombre est défini par

$$\text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\kappa},\tag{1.81}$$

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 (1.80) donnent (en prenant $d = 3$) :

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

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 1.9. 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 (1.80), 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 1.10. 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).

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 (1.38), 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) [5], et en aérodynamique avec la célèbre méthode *Direct Simulation Monte Carlo* (DSMC) [2, 4].

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 [2] 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 (1.38), 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 [15, 7] 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 :

$$\partial_t f + v \partial_x f = \frac{1}{\varepsilon \tau} (M[\rho, u, T] - f), \quad (1.82)$$

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

$$f(t, x = -1, v > 0) = f_G \quad \text{et} \quad f(t, x = 1, v < 0) = f_D. \quad (1.83)$$

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 (1.82) et des conditions aux limites (1.83). 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, $v_j = v_{min} + j\Delta v$, 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 (1.82) 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

$$\partial_t f_j(t, x) + v_j \partial_x f_j(t, x) = \frac{1}{\varepsilon \tau} (M[\rho, u, T](v_j) - f_j(t, x)), \quad (1.84)$$

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 1.11.

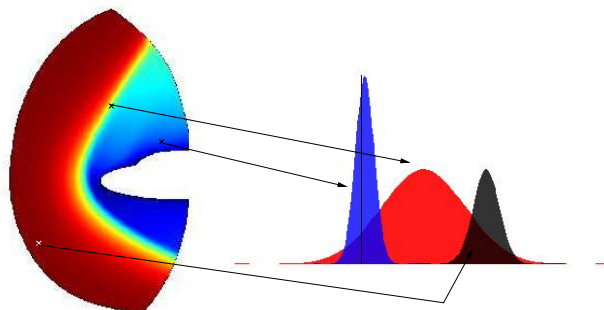


FIGURE 1.11 – Différentes distributions en trois points différents du domaine de calcul (écoulement hypersonique autour du nez d'une navette)

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 proche de l'intégrale totale à 99% près⁶, voir la figure 1.12. Dans des cas plus complexes, il

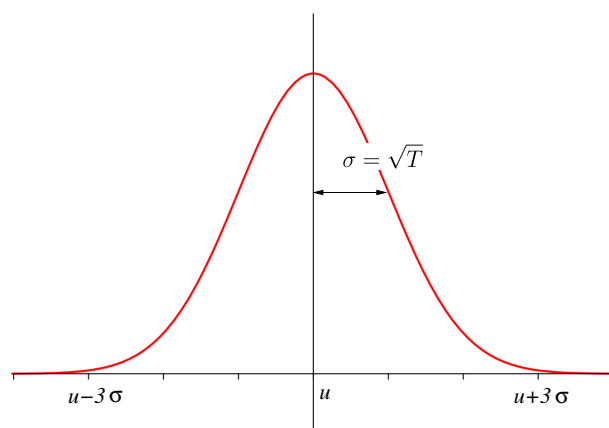


FIGURE 1.12 – Distribution maxwellienne et intervalle de confiance à 99%.

faut alors définir l'intervalle qui permet de décrire toutes les distributions (voir figure 1.13).

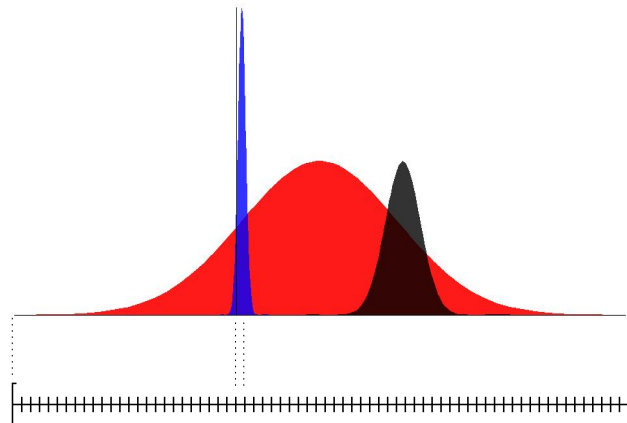


FIGURE 1.13 – Grille de vitesse construite pour capturer trois distributions : les bornes sont déterminées par la distribution rouge, et le pas par la distribution en bleu.

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.

6. 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%.

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 (1.84) en temps et en espace.

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 (1.84) 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

$$\frac{f_{i,j}^{n+1} - f_{i,j}^n}{\Delta t_n} + v_j^+ \frac{f_{i,j}^n - f_{i-1,j}^n}{\Delta x} + v_j^- \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i,j}^n}{\Delta x} = \frac{1}{\varepsilon \tau_i^n} (M[\rho_i^n, u_i^n, T_i^n](v_j) - f_{i,j}^n), \quad (1.85)$$

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

$$\Delta t_n \leq \left(\frac{1}{\Delta t_{transp}} + \frac{1}{\Delta t_{coll}} \right)^{-1}, \quad (1.86)$$

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 (1.86). Ainsi, tous les coefficients étant positifs, la positivité de $f_{i,j}^{n+1}$ est garantie. \square

Remarque 1.11. 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} .

12 Exercices

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

Exercice 1.9. 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 1.10. Montrer que l'opérateur de collision BGK est invariant par transformation orthogonale, c.-à-d.

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

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 4).

Exercice 1.11. 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 (1.29). 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.

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 :

$$\partial_t f + v \partial_x f = 0, \quad (1.87)$$

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

$$E = \frac{1}{2} \rho |u|^2 + \frac{1}{2} \rho T \quad \text{et } p = \rho T. \quad (1.88)$$

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

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

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

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

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 :

$$\partial_t f + v \partial_x f = \frac{1}{\varepsilon \tau} (M[\rho, u, T] - f), \quad (1.89)$$

où ε est le nombre de Knudsen. On considère l'équation (1.89) 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)`, `fnp1(1:nx-1,0:nv)`, `rho(0:nx)`, `rhov(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 ?

Application aux écoulements incompressibles : la méthode "Boltzmann sur réseau"

Sommaire

1	Introduction	63
2	Équations de Stokes	64
3	Régime bas Mach : de Boltzmann à Stokes	65
4	Discrétisation en vitesse : le modèle D2Q9	75
5	Discrétisation en temps et espace : méthode de Boltzmann sur réseau	77
6	Mise en oeuvre	84
7	Extensions	85
8	TP : initiation à la méthode Boltzmann sur réseau	86

1 Introduction

La méthode "Boltzmann sur réseau" ou "Lattice Boltzmann" en anglais (notée LBM dans la suite de cette partie) est une méthode numérique pour simuler les écoulements de fluides incompressibles. Elle est basée sur une interprétation cinétique des équations de Navier-Stokes. Son principal avantage est qu'elle se programme *très* facilement. En outre, les codes basés sur cette méthode sont très bien adaptés au calcul sur des ordinateurs massivement parallèles.

Elle fait partie des méthodes dites à frontières immergées : le maillage utilisé est une grille cartésienne (éventuellement avec différents niveaux de raffinement), et toute paroi solide est prise en compte par son intersection avec les cellules carrées du maillage. Contrairement aux méthodes usuelles basées sur des discrétisations des équations de la mécanique des fluides, la méthode LBM n'est pas basée sur une technique volumes finis ou éléments finis.

Cette méthode fait l'objet d'une littérature abondante, et elle a conduit à la mise au point de plusieurs grands codes de calcul. Parmi ceux-ci, mentionnons ProLB, développé par un consortium dont font partie Renault et Airbus. Malheureusement, il n'est pas facile

de trouver des références accessibles pour comprendre les fondements de LBM. On pourra consulter par curiosité l'article [18] dans lequel a été introduite la méthode présentée ici, mais il fait 5 pages seulement ! Une référence plus claire est [11] : bien qu'il manque quelques détails importants, un certain nombre d'éléments donnés ici proviennent de cet article. Nous avons aussi utilisé l'article complet [12] (assez technique) sur l'analyse asymptotique des schémas LBM. Nous mentionnons enfin les travaux de F. Dubois [8] et S. Dellacherie [6] qui proposent d'autres interprétations de la méthode LBM.

Pour terminer cette introduction, nous donnons un bref aperçu de la façon dont nous construisons la méthode LBM dans ce chapitre. Précisons tout d'abord que dans un souci de simplicité, nous nous restreignons ici à une méthode LBM pour la simulation d'une version simplifiée des équations de Navier-Stokes incompressibles que sont les équations de Stokes. Celles-ci sont brièvement présentées dans le chapitre 2. Ensuite, nous montrons dans le chapitre 3 que la vitesse macroscopique associée à l'équation BGK converge vers la solution des équations de Stokes quand le nombre de Knudsen et le nombre de Mach tendent vers 0. Dans le chapitre 4, nous montrons que l'on peut remplacer l'équation BGK par une équation à vitesses discrètes (le modèle D2Q9) qui est lui aussi asymptotiquement équivalent aux équations de Stokes, et bien plus simple à résoudre que le modèle BGK continu. Enfin, nous verrons dans le chapitre 5 que cette équation peut être discrétisée en temps et en espace de façon astucieuse, afin d'obtenir un schéma consistant avec les équations de Stokes. C'est ce schéma qui constitue la méthode LBM, qui sera ensuite mise en oeuvre dans le TP proposé dans le chapitre 8.

2 Équations de Stokes

Le champ de vitesse d'un écoulement lent et incompressible peut être modélisé par les équations de Stokes qui s'écrivent

$$\begin{aligned}\nabla_x \cdot u &= 0 \\ \rho \partial_t u + \nabla_x p &= \mu \Delta_x u,\end{aligned}\tag{2.1}$$

où ρ est la masse volumique du fluide, supposée constante, et p est sa pression. En divisant la deuxième équation par ρ et en définissant la *viscosité cinématique* $\nu = \mu/\rho$, on a l'expression équivalente

$$\begin{aligned}\nabla_x \cdot u &= 0 \\ \partial_t u + \nabla_x P &= \nu \Delta_x u,\end{aligned}\tag{2.2}$$

où $P = p/\rho$. Cette dernière variable est souvent appelée pression, comme nous le ferons par la suite, bien que ce terme ait la dimension d'une énergie par unité de masse.

On utilise souvent la version adimensionnée de ces équations. Elle s'obtient ainsi : on se donne une longueur caractéristique x_* , une vitesse macroscopique de référence u_* (comme la vitesse d'une paroi par exemple), et on en déduit un temps de référence macroscopique $t_* = x_*/u_*$. On choisit en outre la pression caractéristique $p_* = \rho u_*^2$, ce qui induit la valeur de P caractéristique $P_* = u_*^2$. On définit ensuite les variables adimensionnées $x' = x/x_*$,

$u' = u/u_*$, $t' = t/t_*$, et $P' = P/P_*$, et l'on trouve les équations

$$\begin{aligned}\nabla_{x'} \cdot u' &= 0 \\ \partial_{t'} u' + \nabla_{x'} P' &= \frac{1}{\text{Re}} \Delta_{x'} u',\end{aligned}\tag{2.3}$$

où Re est le *nombre de Reynolds* défini par

$$\text{Re} = \frac{u_* x_*}{\nu}.\tag{2.4}$$

3 Régime bas Mach : de Boltzmann à Stokes

Considérons l'équation BGK de la théorie cinétique des gaz (voir la section 9.5 page 42) :

$$\partial_t F + v \cdot \nabla_x F = \frac{1}{\tau} (M[\rho, u, T] - F),\tag{2.5}$$

où v est la variable de vitesse que nous considérerons dans un espace de dimension d non précisée pour le moment. Rappelons que la maxwellienne $M[\rho, u, T]$ est définie par

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

où ρ , u , et T sont liés aux moments d'ordre 0, 1, et 2 de F par rapport à v . En particulier, on a

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^d} F dv \quad \text{et} \quad \rho u = \int_{\mathbb{R}^d} v F dv.$$

Nous avons déjà vu que lorsque le nombre de Knudsen est suffisamment petit, les quantités macroscopiques associées à cette équation satisfont les équations de Navier-Stokes de la dynamique des gaz compressibles (voir la section 10.3 page 47).

Il est connu que sous certaines hypothèses (écoulement isotherme et à nombre de Mach faible), les équations de Navier-Stokes conduisent aux équations de Stokes (2.2). Dans cette section, nous allons montrer que sous les mêmes hypothèses, l'équation BGK (2.5) conduit elle aussi, dans une certaine limite asymptotique, aux équations de Stokes (2.2).

3.1 Modèle BGK linéarisé

Dans un premier temps, supposons donc que la température T est une constante donnée, et que le nombre de Mach $\text{Ma} = \frac{\|u\|}{\sqrt{RT}}$ est très petit. Ce nombre mesure le rapport entre la vitesse macroscopique du fluide et la vitesse du son (ou vitesse d'agitation thermique des molécules). Par un simple développement de Taylor, ces hypothèses permettent de linéariser la maxwellienne pour obtenir

$$M[\rho, u, T] = M[1, 0, T] \rho \left(1 + \frac{u \cdot v}{RT}\right) + O(\text{Ma}^2).$$

On néglige alors le terme en $O(\text{Ma}^2)$ pour aboutir au modèle BGK linéarisé suivant :

$$\partial_t F + v \cdot \nabla_x F = \frac{1}{\tau} \left(M[1, 0, T] \rho \left(1 + \frac{u \cdot v}{RT}\right) - F \right).\tag{2.6}$$

Pour simplifier encore le modèle, on préfère changer d'inconnue en utilisant la distribution f définie par la relation

$$F = M[1, 0, T]f,$$

de sorte que ρ et ρu soient définis par

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^d} F dv = \int_{\mathbb{R}^d} f M[1, 0, T]dv \quad \text{et} \quad \rho u = \int_{\mathbb{R}^d} v f M[1, 0, T]dv. \quad (2.7)$$

L'équation satisfaite par f est alors

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\tau}(f_{eq} - f), \quad (2.8)$$

où f_{eq} est la distribution d'équilibre linéarisée définie par

$$f_{eq} = \rho \left(1 + \frac{u \cdot v}{RT}\right). \quad (2.9)$$

Enfin, l'analyse asymptotique menée section 10.3 page 47 a montré que la viscosité des équations de Navier-Stokes et le temps de relaxation τ de l'équation BGK sont liés par la relation $\mu = \tau p = \tau \rho RT$, ce qui donne $\nu = \tau RT$. Les deux quantités ν et T étant supposées constantes ici, nous supposons donc que τ lui-même est constant dans la suite, et nous chercherons à vérifier que la relation $\nu = \tau RT$ est bien satisfaite dans ce nouveau cadre.

Exercice 2.1. Montrer la maxwellienne linéarisée possède les mêmes moments d'ordre 0 et 1 que f , mais pas celui d'ordre 2. Quelles sont alors les lois de conservation associées à (2.8) ?

3.2 Adimensionnement

Tous les outils utilisés ici ont déjà été vus auparavant (voir section 10.1 page 43), mais l'adimensionnement que nous utilisons est légèrement différent : il utilise en effet deux échelles de vitesses. On se donne une longueur caractéristique x_* , une vitesse macroscopique de référence u_* (comme la vitesse d'une paroi par exemple), et on en déduit un temps de référence macroscopique $t_* = x_*/u_*$. On se donne aussi une vitesse microscopique de référence $v_* = \sqrt{RT}$ (la vitesse thermique). La vitesse thermique est souvent notée c_s dans la littérature LBM, et appelée vitesse du son dans le gaz, bien que la véritable vitesse du son soit $5c_s/3$ (voir section 5 page 23). On choisit en outre une valeur caractéristique de la distribution $f_* = \rho_*$. En définissant les variables adimensionnées $(\cdot)' = (\cdot)/(\cdot)_*$, on trouve la version adimensionnée de (2.8) :

$$\partial_{t'} f' + \frac{1}{\text{Ma}} v' \cdot \nabla_{x'} f' = \frac{1}{\text{Kn Ma}} (f'_{eq} - f'), \quad (2.10)$$

où Kn est le nombre de Knudsen, qui a été défini section 10.1 page 43 et Ma est le nombre de Mach. Ces deux nombres sans dimension sont définis ici par

$$\text{Kn} = l/x_* = \tau c_s/x_* \quad \text{et} \quad \text{Ma} = u_*/c_s. \quad (2.11)$$

La distribution d'équilibre adimensionnée f'_{eq} est définie par

$$f'_{eq} = \rho' + \text{Ma} \rho' u' \cdot v', \quad (2.12)$$

et ρ' et u' sont définies par $\rho' = \rho/\rho_*$ et $u' = u/u_*$, mais peuvent aussi être définies par la densité et vitesse associées à f' . En effet, injectons les relations précédentes et la relation $f' = f/f_*$ dans (2.7) pour trouver

$$\rho_*\rho' = \int_{\mathbb{R}^d} f_*f' M[1, 0, T]dv \quad \text{et} \quad \rho_*u_*\rho'u' = \int_{\mathbb{R}^d} v f_*f' M[1, 0, T]dv.$$

Ensuite, le changement de variables $v \mapsto v' = v/v_*$ donne $M[1, 0, T](v)dv = M_0(v')dv'$ et $vM[1, 0, T](v)dv = v_*v'M_0(v')dv'$, ou nous notons M_0 la maxwellienne absolue définie par

$$M_0(v') = M[1, 0, 1](v') = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \exp\left(-\frac{|v'|^2}{2}\right).$$

Rappelons enfin que $f_* = \rho_*$ pour trouver

$$\rho' = \int_{\mathbb{R}^d} f' M_0 dv' \quad \text{et} \quad \text{Ma} \rho'u' = \int_{\mathbb{R}^d} v' f' M_0 dv'. \quad (2.13)$$

La maxwellienne absolue apparaît maintenant comme un poids pour définir les moments de f' . Pour simplifier les notations qui vont suivre, nous noterons désormais $\langle \phi M_0 \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \phi(v') M_0(v') dv'$ pour toute fonction ϕ de v' . Ainsi, (2.13) peut s'écrire

$$\rho' = \langle f' M_0 \rangle \quad \text{et} \quad \rho'u' = \frac{1}{\text{Ma}} \langle v' f' M_0 \rangle. \quad (2.14)$$

3.3 Analyse asymptotique

Supposons maintenant que le nombre de Knudsen et le nombre de Mach sont tous deux petits (régime fluide et incompressible), et du même ordre : pour clarifier cette hypothèse fondamentale pour la suite, nous introduisons un petit paramètre ε et nous supposons $\text{Kn} = \text{Ma} = \varepsilon$. Par ailleurs, pour simplifier les notations dans la longue analyse qui va suivre, nous ne noterons plus les variables adimensionnées avec des primes ' : cette notation ne sera utilisée à nouveau que lorsque nous reviendrons aux variables dimensionnelles.

Avec cette hypothèse et ces notations, l'équation BGK linéarisée s'écrit

$$\partial_t f + \frac{1}{\varepsilon} v \cdot \nabla_x f = \frac{1}{\varepsilon^2} (f_{eq} - f), \quad (2.15)$$

avec

$$f_{eq} = \rho + \varepsilon \rho u \cdot v, \quad (2.16)$$

et ρ et u sont définis par

$$\rho = \langle f M_0 \rangle \quad \text{et} \quad \rho u = \frac{1}{\varepsilon} \langle v f M_0 \rangle. \quad (2.17)$$

L'analyse asymptotique adéquate ici, comme pour toutes les équations cinétiques linéaires écrites avec cet adimensionnement (on parle d'échelle de *diffusion*), est celle du développement de Hilbert que nous présentons maintenant.

On va chercher une solution approchée de (2.15) sous la forme du développement en série

$$f = f_0 + \varepsilon f_1 + \varepsilon^2 f_2 + \varepsilon^3 f_3 \dots \quad (2.18)$$

Tout d'abord, remarquons que si ce développement est possible, cela signifie que f tend vers f_0 quand ε tend vers 0. Or on voit facilement que (2.15) et (2.16) impliquent $f = \rho + O(\varepsilon)$, et donc que f tend vers la limite de sa densité que nous noterons ρ_0 . Ainsi, le premier terme de ce développement est nécessairement $f_0 = \rho_0$.

L'idée consiste ensuite à introduire ce développement dans (2.15) et à construire les différents termes f_k du développement de sorte que tous les facteurs des différentes puissances de ε s'annulent, du moins jusqu'à un certain ordre. Commençons par calculer le développement de f_{eq} en puissances de ε induit par (2.18). Naturellement, la définition (2.17) de ρ donne

$$\rho = \langle f M_0 \rangle = \left\langle \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k f_k M_0 \right\rangle = \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k \langle f_k M_0 \rangle = \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k \rho_k,$$

où l'on note $\rho_k = \langle f_k M_0 \rangle$. Ensuite, on note $U = \rho u$, et la relation (2.17) donne

$$U = \frac{1}{\varepsilon} \langle v f M_0 \rangle = \frac{1}{\varepsilon} \left\langle v \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k f_k M_0 \right\rangle = \frac{1}{\varepsilon} \sum_{k \geq 0} \varepsilon^k \langle v f_k M_0 \rangle = \frac{1}{\varepsilon} U_0 + U_1 + \varepsilon U_2 + \dots,$$

où l'on note $U_k = \langle v f_k M_0 \rangle$. Nous avons déjà remarqué que $f_0 = \rho_0$, ce qui implique $U_0 = \langle v \rho_0 M_0 \rangle = \langle v M_0 \rangle \rho_0 = 0$. Ainsi, la distribution d'équilibre f_{eq} peut s'écrire

$$\begin{aligned} f_{eq} &= \rho_0 + \varepsilon(\rho_1 + U_1 \cdot v) + \varepsilon^2(\rho_2 + U_2 \cdot v) + \dots \\ &= f_{eq,0} + \varepsilon f_{eq,1} + \varepsilon^2 f_{eq,2} + \dots, \end{aligned} \quad (2.19)$$

où $f_{eq,0} = \rho_0$ et $f_{eq,k} = \rho_k + U_k \cdot v$ pour tout $k \geq 1$.

Propriété 2.1. *Pour tout k , les distributions f_k et $f_{eq,k}$ ont mêmes moments d'ordre 0 et 1 :*

$$\langle f_k M_0 \rangle = \langle f_{eq,k} M_0 \rangle = \rho_k \quad \text{et} \quad \langle v f_k M_0 \rangle = \langle v f_{eq,k} M_0 \rangle = U_k.$$

Démonstration. Il suffit de remplacer $f_{eq,k}$ par sa définition dans les relations précédentes, et d'utiliser les intégrales gaussiennes :

$$\langle M_0 \rangle = 1, \quad \langle v M_0 \rangle = 0, \quad \langle v \otimes v M_0 \rangle = I, \quad (2.20)$$

qui sont démontrées dans l'annexe 2.2 page 125. \square

Nous sommes maintenant prêts pour identifier les différents termes f_k du développement de Hilbert : en injectant (2.18) et (2.19) dans (2.15) et en rassemblant les termes du même ordre en ε , on trouve

$$\begin{aligned} &\varepsilon^{-1} v \cdot \nabla_x f_0 + \varepsilon^0 (\partial_t f_0 + v \cdot \nabla_x f_1) + \varepsilon (\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2) + O(\varepsilon^2) \\ &= \varepsilon^{-2} (f_{eq,0} - f_0) + \varepsilon^{-1} (f_{eq,1} - f_1) + \varepsilon^0 (f_{eq,2} - f_2) + \varepsilon^1 (f_{eq,3} - f_3) + O(\varepsilon^2) \end{aligned}$$

On cherche donc s'il est possible de construire f_0, f_1, f_2 , etc. pour que les facteurs de $\varepsilon^2, \varepsilon^{-1}, \varepsilon^0$, et ε s'annulent.

Termes en ε^{-2} . Ce terme est nul, puisque

$$f_0 = f_{eq,0} = \rho_0, \quad (2.21)$$

mais il faut noter que ρ_0 reste à déterminer.

Termes en ε^{-1} . On trouve

$$v \cdot \nabla_x f_0 = f_{eq,1} - f_1. \quad (2.22)$$

Comme $\langle (f_{eq,1} - f_1)M_0 \rangle = 0$ et $\langle v(f_{eq,1} - f_1)M_0 \rangle = 0$ (voir la propriété 2.1), cette équation admet une solution f_1 seulement si le membre de gauche satisfait les relations $\langle v \cdot \nabla_x f_0 M_0 \rangle = 0$ et $\langle v(v \cdot \nabla_x f_0)M_0 \rangle = 0$.

La première relation donne

$$0 = \langle v \cdot \nabla_x \rho_0 M_0 \rangle = \langle v M_0 \rangle \cdot \nabla_x \rho_0,$$

qui est nécessairement vérifiée puisque par parité de M_0 on a $\langle v M_0 \rangle = 0$. La deuxième donne

$$0 = \langle v(v \cdot \nabla_x \rho_0)M_0 \rangle = \langle v \otimes v M_0 \rangle \nabla_x \rho_0 = \nabla_x \rho_0$$

d'après (2.20). Ainsi, l'existence de f_1 impose une contrainte à ρ_0 qui doit être indépendant de x . Donc ρ_0 ne dépend que de t , et le plus simple est alors de choisir ρ_0 comme une constante : nous avons ainsi $\nabla_x \rho_0 = 0$ et $\partial_t \rho_0 = 0$. Plus précisément, puisque ρ_0 est adimensionnée, il est raisonnable de choisir $\rho_0 = 1$.

Enfin, nous pouvons alors déduire de (2.22), (2.21) et du résultat précédent l'expression suivante de f_1 :

$$\begin{aligned} f_1 &= f_{eq,1} - v \cdot \nabla_x \rho_0 \\ &= \rho_1 + U_1 \cdot v, \end{aligned} \quad (2.23)$$

où ρ_1 et U_1 restent à déterminer.

Termes en ε^0 . On trouve

$$\partial_t f_0 + v \cdot \nabla_x f_1 = f_{eq,2} - f_2. \quad (2.24)$$

Nous utilisons à nouveau la propriété 2.1 qui assure que f_2 et $f_{eq,2}$ ont mêmes moments d'ordre 0 et 1 : cela montre que f_2 ne peut exister que si le membre de gauche de (2.24) satisfait les relations

$$\langle (\partial_t f_0 + v \cdot \nabla_x f_1)M_0 \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle v(\partial_t f_0 + v \cdot \nabla_x f_1)M_0 \rangle = 0.$$

Dans la première relation, on utilise le fait que ρ_0 est une constante ainsi que la relation (2.23) pour trouver

$$\begin{aligned} 0 &= \langle v \cdot \nabla_x f_1 M_0 \rangle = \nabla_x \cdot \langle v f_1 M_0 \rangle = \nabla_x \cdot \langle v(\rho_1 + U_1 \cdot v)M_0 \rangle \\ &= \nabla_x \cdot (\langle v M_0 \rangle \rho_1 + \langle v \otimes v M_0 \rangle U_1) = \nabla_x \cdot U_1, \end{aligned}$$

d'après (2.20). On trouve ainsi que U_1 est nécessairement à divergence nulle :

$$\nabla_x \cdot U_1 = 0. \quad (2.25)$$

Nous utilisons les mêmes arguments dans la deuxième relation, mais en utilisant cette fois la notation indicielle et la convention d'Einstein (qui veut que tout indice répété est supposé être sommé). Nous avons alors

$$\begin{aligned} 0 &= \langle v(v \cdot \nabla_x f_1) M_0 \rangle = \partial_{x_j} \langle v_i v_j f_1 M_0 \rangle = \partial_{x_j} \langle v_i v_j (\rho_1 + U_1 \cdot v) M_0 \rangle \\ &= \partial_{x_j} (\langle v_i v_j M_0 \rangle \rho_1 + \langle v_i v_j v_k M_0 \rangle U_{1,k}) = \partial_{x_j} \rho_1, \end{aligned}$$

où l'on a utilisé une autre intégrale gaussienne

$$\langle v_i v_j v_k M_0 \rangle = 0,$$

qui résulte d'un simple argument de parité de M_0 . On a donc trouvé la même relation pour ρ_1 que pour ρ_0 , et l'on choisira là aussi ρ_1 égal à une constante, qu'il est naturel de prendre égale à 0, puisque ρ_1 représente une perturbation de la densité.

Enfin, nous concluons cette étape avec l'expression correspondante de f_2 : puisque $f_0 = \rho_0$ et $f_1 = \rho_1 + U_1 \cdot v$ avec ρ_0 et ρ_1 constantes, il vient

$$\begin{aligned} f_2 &= f_{eq,2} - (\partial_t f_0 + v \cdot \nabla_x f_1) \\ &= \rho_2 + U_2 \cdot v - v \cdot \nabla_x (U_1 \cdot v), \end{aligned} \quad (2.26)$$

où ρ_2 et U_2 restent à déterminer.

Termes en ε^1 . On suit exactement le même raisonnement qu'à l'étape précédente. On trouve

$$\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2 = f_{eq,3} - f_3. \quad (2.27)$$

Les contraintes de moments égaux pour $f_{eq,3}$ et f_3 donnent les deux relations

$$\langle (\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2) M_0 \rangle = 0 \quad \text{et} \quad \langle v (\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2) M_0 \rangle = 0.$$

En remplaçant f_1 et f_2 par leurs expressions données dans (2.23) et (2.26), la première relation donne facilement $\nabla_x \cdot U_2 = 0$. La deuxième relation donne, en notation indicielle,

$$\begin{aligned} 0 &= \partial_t \langle v_i f_1 M_0 \rangle + \partial_{x_j} \langle v_i v_j f_2 M_0 \rangle \\ &= \partial_t U_1 + \nabla_x \rho_2 - \partial_{x_j} \langle v_i v_j (v_k \partial_{x_k} (U_{1,l} v_l)) M_0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Le dernier terme fait donc intervenir une intégrale gaussienne d'ordre 4 qui s'écrit

$$\partial_{x_j} \langle v_i v_j (v_k \partial_{x_k} (U_{1,l} v_l)) M_0 \rangle = \partial_{x_j} \langle v_i v_j v_k (\partial_{x_k} U_{1,l}) v_l M_0 \rangle.$$

On utilise ensuite la formule établie en annexe 2.2 page 125 pour obtenir

$$\langle v_i v_j v_k \partial_{x_k} U_{1,l} v_l M_0 \rangle = \partial_{x_j} U_{1,i} + \partial_{x_i} U_{1,j} + \delta_{ij} \partial_{x_k} U_{1,k}.$$

Ainsi, le dernier terme de (2.28) s'écrit

$$\begin{aligned} \partial_{x_j} \langle v_i v_j (v_k \partial_{x_k} (U_{1,l} v_l)) M_0 \rangle &= \partial_{x_j} \partial_{x_j} U_{1,i} + \partial_{x_j} \partial_{x_i} U_{1,j} + \partial_{x_j} \delta_{ij} \partial_{x_k} U_{1,k} \\ &= \Delta_x U_1 + \nabla_x (\nabla_x \cdot U_1) + \nabla_x (\nabla_x \cdot U_1) = \Delta_x U_1, \end{aligned} \quad (2.29)$$

puisque $\nabla_x \cdot U_1 = 0$. Enfin, les relations (2.29) et (2.28) précédentes donnent

$$\partial_t U_1 + \nabla_x \rho_2 = \Delta U_1. \quad (2.30)$$

Nous pouvons aussi en déduire l'expression $f_3 = f_{eq,3} - (\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2)$ qu'il n'est pas nécessaire de développer ici.

Résumé. Rappelons que nous souhaitons définir les distributions f_k pour que le développement de Hilbert (2.18) soit solution de l'équation (2.15). Nous avons obtenu les relations suivantes :

$$\begin{aligned} f_0 &= \rho_0 \\ f_1 &= \rho_1 + U_1 \cdot v \\ f_2 &= \rho_2 + U_2 \cdot v - v \cdot \nabla_x (U_1 \cdot v) \\ f_3 &= f_{eq,3} - (\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2), \end{aligned}$$

où ρ_0 et ρ_1 sont deux constantes quelconques, ρ_2 et U_1 sont solutions du système de Stokes

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot U_1 &= 0 \\ \partial_t U_1 + \nabla_x \rho_2 &= \Delta U_1, \end{aligned}$$

U_2 vérifie $\nabla_x \cdot U_2 = 0$, et ρ_3 et U_3 sont indéterminés. Cela nous permet de définir la fonction $f_\varepsilon = f_0 + \varepsilon f_1 + \varepsilon^2 f_2 + \varepsilon^3 f_3$, appelée développement de Hilbert à l'ordre 3. Nous vérifions maintenant a posteriori dans quelle mesure f_ε satisfait l'équation (2.15) : d'après la construction précédente, on a

$$\partial_t f_\varepsilon + \frac{1}{\varepsilon} v \cdot \nabla_x f_\varepsilon - \frac{1}{\varepsilon^2} (f_{eq,\varepsilon} - f_\varepsilon) = O(\varepsilon^2).$$

Donc f_ε satisfait l'équation (2.15) à l'ordre deux près par rapport à ε . Si f_ε et f vérifient en outre la même donnée initiale et les mêmes conditions aux limites (à $O(\varepsilon^2)$ au moins), alors il semble clair que f_ε et f sont égales à $O(\varepsilon^2)$ près (ce qui peut se montrer rigoureusement), et nous avons donc construit une approximation de f .

En ce qui concerne la donnée initiale, nous pouvons constater que le choix des constantes $\rho_0 = 1$ et $\rho_1 = 0$ permet d'avoir une bonne approximation de la donnée initiale $f(t = 0)$. Supposons en effet que la donnée initiale soit à l'équilibre, c.-à-d.

$$f(t = 0, x, v) = f_{eq}(t = 0, x, v) = \rho(t = 0) + \varepsilon U(t = 0) \cdot v,$$

où $\rho(t = 0)$ et $U(t = 0)$ sont deux constantes données. Si la densité de référence ρ_* est donnée par la densité initiale, on a donc, en variables adimensionnées $\rho(t = 0) = 1$. Par ailleurs, à l'instant initial, notre approximation vaut $f_\varepsilon(t = 0) = \rho_0 + \varepsilon \rho_1 + \varepsilon U_1(t = 0) \cdot v + O(\varepsilon^2)$.

Avec le choix des constantes ρ_0 et ρ_1 fait ci-dessus, si en plus nous imposons à U_1 la valeur initiale $U_1(t=0) = U(t=0)$, alors on a $f_\varepsilon(t=0) = \rho(t=0) + \varepsilon U(t=0) \cdot v + O(\varepsilon^2) = f(t=0) + O(\varepsilon^2)$, et l'ordre d'approximation est bien préservé à l'instant initial.

Il reste enfin à définir les fonctions U_2 , ρ_3 et U_3 . L'analyse précédente n'impose rien sur ces fonctions (hormis $\nabla_x \cdot U_2 = 0$), et rien ne nous empêche de poser tout simplement $U_2 = 0$, $\rho_3 = 0$ et $U_3 = 0$ en tout temps et tout point de l'espace.

En résumé, la fonction $f_\varepsilon = \rho_0 + \varepsilon U_1 \cdot v + \varepsilon^2(\rho_2 - v \cdot \nabla_x(U_1 \cdot v)) - \varepsilon^3(\partial_t f_1 + v \cdot \nabla_x f_2)$ est solution de l'équation BGK linéarisée (2.15) à $O(\varepsilon^2)$ près si $\rho_0 = \rho(t=0)$ et si (U_2, ρ_2) est solution du problème de Stokes

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot U_1 &= 0 \\ \partial_t U_1 + \nabla_x \rho_2 &= \Delta U_1, \end{aligned} \tag{2.31}$$

avec la donnée initiale $U_1(t=0) = U(t=0)$.

Que peut-on en déduire sur la limite de f quand ε tend vers 0? Pour la densité, nous avons

$$\begin{aligned} \rho &= \langle f M_0 \rangle = \langle f_\varepsilon M_0 \rangle + O(\varepsilon^2) \\ &= \rho_0 + O(\varepsilon^2) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \rho_0. \end{aligned}$$

Pour l'impulsion, nous avons

$$\begin{aligned} U &= \frac{1}{\varepsilon} \langle v f M_0 \rangle = \frac{1}{\varepsilon} \langle v (f_\varepsilon + O(\varepsilon^2)) M_0 \rangle \\ &= U_1 + O(\varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} U_1. \end{aligned}$$

En conclusion, nous avons bien montré que l'impulsion de la solution de l'équation BGK linéarisée (2.15) converge, quand ε tend vers 0, vers la solution du problème de Stokes, où ρ_2 joue le rôle de pression.

Remarque 2.1. Il est possible de mener cette même analyse un ordre plus loin : on peut alors construire une approximation d'ordre trois qui permet de montrer que la perturbation de ρ autour de sa limite ρ_0 converge vers ρ_2 , c'est-à-dire :

$$\frac{(\rho - \rho_0)}{\varepsilon^2} \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \rho_2.$$

Remarque 2.2. Nous n'avons pas parlé ici du problème d'approximation dû aux conditions aux limites. Cela est beaucoup plus délicat et sera abordé uniquement d'un point de vue numérique dans la section 6.

3.4 Retour aux variables dimensionnelles

Il est intéressant pour la suite de réinterpréter le résultat de la section précédente en variables dimensionnelles : le but de cette section est essentiellement d'établir une relation entre le temps de relaxation de l'équation BGK linéarisée (2.8) et la viscosité cinématique des équations de Stokes.

Nous sommes partis de la solution f de l'équation BGK linéarisée (2.8) et des variables macroscopiques

$$\rho = \int_{\mathbb{R}^d} f M[1, 0, T] dv \quad \text{et} \quad u = \frac{1}{\rho} \int_{\mathbb{R}^d} v f M[1, 0, T] dv.$$

Nous avons défini la distribution adimensionnée f' solution de (2.15), avec les variables macroscopiques correspondantes

$$\rho' = \langle f' M_0 \rangle \quad \text{et} \quad u' = \frac{1}{\rho' \varepsilon} \langle v' f' M_0 \rangle.$$

Par construction, les variables macroscopiques dimensionnelles et adimensionnées sont liées par

$$\rho = \rho_* \rho' \quad \text{et} \quad u = u_* u'. \quad (2.32)$$

Nous avons ensuite montré que ρ' et u' admettent les limites suivantes quand ε tend vers 0 :

$$\rho' \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \rho'_0 \quad \text{et} \quad u' = U'/\rho' \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u'_1 = U'_1/\rho'_0. \quad (2.33)$$

En divisant par ρ'_0 les équations de Stokes (2.31) satisfaites par U'_1 , on trouve que u'_1 est solution des équations

$$\begin{aligned} \nabla_{x'} \cdot u'_1 &= 0 \\ \partial_{t'} u'_1 + \nabla_{x'} P'_2 &= \Delta_{x'} u'_1, \end{aligned} \quad (2.34)$$

avec la pression adimensionnée $P'_2 = \rho'_2/\rho'_0 = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\rho'/\rho'_0 - 1}{\varepsilon^2}$. Ces équations ne sont autres que les équations de Stokes adimensionnées (2.3) avec le nombre de Reynolds $\text{Re} = 1$ (voir la remarque 2.4 au sujet de cette relation en fin de chapitre).

Nous cherchons à présent à calculer les limites des quantités macroscopiques non adimensionnées ρ et u . D'après (2.32) et (2.33), on a

$$\rho \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} \rho_0 = \rho_* \rho'_0 \quad \text{et} \quad u \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} u_1 = u_* u'_1. \quad (2.35)$$

On obtient l'équation sur u_1 en revenant aux variables dimensionnelles dans (2.34) :

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot u_1 &= 0 \\ \partial_t u_1 + \nabla_x P_2 &= \frac{x_*^2}{t_*} \Delta_x u_1, \end{aligned} \quad (2.36)$$

avec la pression non adimensionnée $P_2 = u_*^2 P'_2$. On voit donc que la vitesse macroscopique de l'équation BGK linéarisée tend vers une solution des équations de Stokes avec la viscosité cinématique

$$\nu = \frac{x_*^2}{t_*}$$

Une expression de ν en fonction du temps de relaxation τ s'obtient en remarquant que l'hypothèse $\text{Kn} = \text{Ma}$ implique que la vitesse de référence u_* dépend de τ , x_* et c_s : en effet

$$\text{Kn} = \text{Ma} \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\tau c_s}{x_*} = \frac{u_*}{c_s} \quad \Leftrightarrow \quad u_* = \frac{\tau c_s^2}{x_*}. \quad (2.37)$$

Ainsi, le temps caractéristique t_* vaut $t_* = x_*/u_* = x_*^2/(\tau c_s^2)$, et on a donc l'expression de la viscosité cinématique de Stokes en fonction du temps de relaxation de BGK :

$$\nu = c_s^2 \tau.$$

La conclusion de cette longue analyse est la suivante : on peut approcher la solution u des équations de Stokes (2.2) par la vitesse $u = \int_{\mathbb{R}^d} v f M[1, 0, T] dv / \int_{\mathbb{R}^d} f M[1, 0, T] dv$, où f est solution de l'équation BGK linéarisée (2.8), sous les conditions suivantes :

$$\tau = \nu/c_s^2, \quad (2.38)$$

et

$$\text{Ma} = u/c_s \ll 1 \quad \text{et} \quad \text{Kn} = \nu/(c_s x_*) \ll 1,$$

où la température T de la maxwellienne $M[1, 0, T]$ est telle que $c_s = \sqrt{RT}$. L'idée de base des méthodes LBM est d'approcher numériquement l'équation BGK linéarisée (2.8) pour obtenir une approximation des équations de Stokes (précise à $O(\text{Ma}^2)$ près). Nous expliquons dans la suite les techniques d'approximation qui permettent d'obtenir une méthode simple et rapide.

Complément sur la pression. La présentation précédente explique comment approcher la vitesse u des équations de Stokes par la résolution de l'équation BGK linéarisée, mais nous n'avons pas expliqué comment obtenir une approximation de la pression. Pour cela revenons à la définition de la pression non adimensionnée P_2 qui apparaît dans les équations limites de Stokes (2.36) : l'analyse précédente donne $P_2 = u_*^2 P'_2$, et rappelons que $P'_2 = \rho'_2/\rho'_0$. Comme on a choisi $\rho'_0 = 1$ (voir page 69), alors $P'_2 = \rho'_2$. En outre, rappelons que la densité adimensionnée vérifie le développement $\rho' = 1 + \varepsilon^2 \rho'_2 + O(\varepsilon^3)$ (où l'on tient compte du fait que ρ'_0 et ρ'_1 ont été choisies égales à 1 et 0, respectivement). Par conséquent, $\rho'_2 = \frac{\rho' - 1}{\varepsilon^2} + O(\varepsilon)$, et l'on peut donc approcher la pression adimensionnée P'_2 par

$$P'_2 \approx \frac{\rho' - 1}{\varepsilon^2},$$

en commettant une erreur d'ordre 1 par rapport à ε . Comme P'_2 est en fait définie à une constante près (si le couple (u'_1, P'_2) est solution des équations de Stokes, alors $(u'_1, P'_2 + cte)$ aussi, quelle que soit la constante), alors on peut supprimer la constante dans la relation précédente pour obtenir une autre approximation :

$$P'_2 \approx \frac{\rho'}{\varepsilon^2}.$$

Par conséquent, la pression non adimensionnée s'approche par

$$P_2 = u_*^2 P'_2 \approx u_*^2 \frac{\rho'}{\varepsilon^2}.$$

Remplaçons maintenant la densité adimensionnée ρ' par ρ/ρ_* pour obtenir l'approximation

$$P_2 \approx u_*^2 \frac{\rho}{\varepsilon^2 \rho_*},$$

Enfin, rappelons que $\varepsilon = \text{Kn} = \text{Ma} = u_*/c_s$, ce qui donne

$$P_2 \approx c_s^2 \rho / \rho_*,$$

et la pression dynamique correspondante $p_2 = \rho_* P_2$, qui s'exprime en pascal, vaut

$$p_2 \approx c_s^2 \rho,$$

où ρ est la densité associée à f , solution de l'équation BGK linéarisée (2.8).

Remarque 2.3. La relation $\tau = \nu/c_s^2$ s'écrit aussi $\tau = \mu/(\rho RT)$ (car $\nu = \mu/\rho$ et $c_s = \sqrt{RT}$), et on retrouve ainsi la relation obtenue par le développement de Chapman-Enskog de l'équation BGK non linéaire (voir section 10.3 page 47).

Remarque 2.4. On peut se demander pourquoi l'équation de Stokes (adimensionnée) obtenue comme limite de l'équation BGK linéarisée fait apparaître un nombre de Reynolds égal à 1. Une première explication se trouve dans la relation connue sous le nom de relation de von Karman qui s'écrit

$$\text{Ma} = \text{Kn Re}, \quad (2.39)$$

à une constante multiplicative près, selon la façon dont on définit le nombre de Knudsen et le nombre de Mach. En effet, on a d'une part $\text{Ma} = u_*/c_s$, et d'autre part $\text{Kn} = \lambda/x_* = c_s \tau / x_*$ et $\text{Re} = u_* x_* / \nu$. Il suffit alors de rappeler la relation $\tau = \nu/c_s^2$ pour conclure. Par conséquent, il est maintenant clair que l'hypothèse $\text{Ma} = \text{Kn}$ implique $\text{Re} = 1$.

Mais comment se fait-il que l'adimensionnement des équations de Stokes du chapitre 2 donne alors un nombre de Reynolds quelconque $\text{Re} = u_* x_* / \nu_*$? Tout simplement car dans cet adimensionnement, la vitesse macroscopique de référence est arbitraire, alors que dans notre analyse asymptotique de l'équation BGK, l'hypothèse $\text{Ma} = \text{Kn}$ impose la vitesse de référence $u_* = \tau c_s^2 / x_*$.

4 Discrétisation en vitesse : le modèle D2Q9

Dans cette section, nous montrons comment discrétiser correctement l'équation BGK linéarisée (2.8) par rapport à la variable de vitesse avec un nombre de vitesses minimal. Supposons connue une grille de vitesses de points v_q . On définit ainsi $f_q(t, x)$ une approximation de $f(t, x, v_q)$ solution de l'équation BGK linéarisée discrète

$$\partial_t f_q + v_q \cdot \nabla_x f_q = \frac{1}{\tau} (f_{eq,q} - f_q), \quad (2.40)$$

où $f_{eq,q}$ est la distribution d'équilibre linéarisée discrète définie par

$$f_{eq,q} = \rho \left(1 + \frac{u \cdot v_q}{c_s^2} \right), \quad (2.41)$$

et où les moments ρ et ρu sont obtenus par une formule de quadrature appliquées aux relations (2.7) :

$$\rho = \sum_q f_q \omega_q \quad \text{et} \quad \rho u = \sum_q v_q f_q \omega_q. \quad (2.42)$$

Les coefficients ω_q sont les poids de la formule de quadrature.

Est-il possible qu'un tel modèle puisse lui aussi être asymptotiquement équivalent aux équations de Stokes ? La réponse est oui : en suivant pas à pas l'analyse asymptotique faite section 3.3, on peut voir que toutes les étapes sont encore valables en remplaçant les intégrales adimensionnées $\langle \phi M_0 \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \phi(v') M_0(v') dv'$ par les formules de quadratures $\sum_q \phi(v'_q) \omega_q$, à la condition que celles-ci satisfasse exactement les relations

$$\begin{aligned}
\sum_q \omega_q &= \langle M_0 \rangle = 1 \\
\sum_q v'_q \omega_q &= \langle v' M_0 \rangle = 0 \\
\sum_q v'_{i,q} v'_{j,q} \omega_q &= \langle v'_i v'_j M_0 \rangle = \delta_{ij} \\
\sum_q v'_{i,q} v'_{j,q} v'_{k,q} \omega_q &= \langle v'_i v'_j v'_k M_0 \rangle = 0 \\
\sum_q v'_{i,q} v'_{j,q} v'_{k,q} v'_{l,q} \omega_q &= \langle v'_i v'_j v'_k v'_l M_0 \rangle = \delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}.
\end{aligned} \tag{2.43}$$

Ces relations constituent des contraintes sur la formule de quadrature, et donc sur les poids et les points qui sont choisis.

À partir de maintenant, nous nous restreindrons aux écoulements bidimensionnels, et nous supposons donc $d = 2$. En supposant la grille de vitesse cartésienne et centrée en 0, il est possible de réduire fortement le nombre des contraintes ci-dessus : comme toutes les fonctions à intégrer sont des produits tensoriels de fonctions à une variable, on peut se ramener à la détermination d'une formule de quadrature à d'ordre 4. Nous cherchons donc les $(n + 1)$ points ζ_q et les $(n + 1)$ poids λ_q tels que la formule

$$\sum_{q=0}^n \phi(\zeta_q) \lambda_q \quad \text{approche} \quad \int_{\mathbb{R}} \phi(\zeta) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2}\right) d\zeta$$

pour toute fonction ϕ , de sorte que la formule soit exacte pour tous les polynômes en ζ de degré inférieur ou égal à 4. Autrement dit, il faut que la formule satisfasse

$$\sum_{q=0}^n \zeta_q^k \lambda_q = \int_{\mathbb{R}} \zeta^k \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{2}\right) d\zeta$$

pour k de 0 à 4. La solution est bien connue : il s'agit de la formule de Gauss-Hermite à 3 points, dont les points et les poids sont $(\zeta_0, \zeta_1, \zeta_2) = (-\sqrt{3}, 0, \sqrt{3})$ et $(\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2) = (\frac{1}{6}, \frac{4}{6}, \frac{1}{6})$. Par construction, cette formule est en fait d'ordre 5.

La formule bidimensionnelle associée s'obtient en tensorisant la formule précédente, et l'on trouve une formule à 9 points, qui sont habituellement numérotés de 0 à 8 comme indiqué dans la figure 2.1.

Ces points sont

$$v'_q = \sqrt{3} \begin{cases} 0 & \text{pour } q = 0 \\ (1, 0), (0, 1), (-1, 0), (0, -1) & \text{pour } q = 1, 2, 3, 4 \\ (1, 1), (-1, 1), (-1, 0), (-1, -1), (1, -1) & \text{pour } q = 5, 6, 7, 8 \end{cases} ,$$

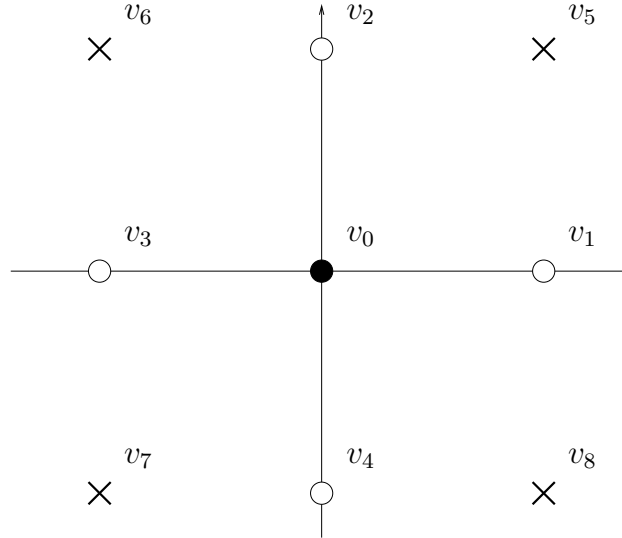


FIGURE 2.1 – Vitesses discrètes du modèle D2Q9

alors que les poids sont

$$\omega_q = \begin{cases} 4/9 & \text{pour } q = 0 \\ 1/9 & \text{pour } q = 1, 2, 3, 4 \\ 1/36 & \text{pour } q = 5, 6, 7, 8 \end{cases}$$

En variables non adimensionnées, les vitesses discrètes correspondantes s'obtiennent en multipliant les vitesses adimensionnées par c_s , et l'on trouve

$$v_q = c_s \sqrt{3} \begin{cases} 0 & \text{pour } q = 0 \\ (1, 0), (0, 1), (-1, 0), (0, -1) & \text{pour } q = 1, 2, 3, 4 \\ (1, 1), (-1, 1), (-1, 0), (-1, -1), (1, -1) & \text{pour } q = 5, 6, 7, 8 \end{cases}$$

alors que les poids sont inchangés.

Exercice 2.2. Vérifier que la formule de quadrature $\sum_q \phi(v'_q) \omega_q$ D2Q9 obtenue ci-dessus satisfait bien les contraintes (2.43).

5 Discrétisation en temps et espace : méthode de Boltzmann sur réseau

5.1 Discrétisation

La discrétisation en temps et en espace du modèle (2.40) se fait par une approche lagrangienne. Ce modèle s'écrit de façon équivalente

$$\frac{d}{dt} f_q(t, x + v_q t) = \frac{1}{\tau} (f_{eq,q}(t, x + v_q t) - f_q(t, x + v_q t)),$$

et après intégration entre t et $t + \Delta t$, on trouve

$$f_q(t + \Delta t, x + v_q(t + \Delta t)) = f_q(t, x + v_q t) + \int_t^{t+\Delta t} \frac{1}{\tau} (f_{eq,q}(s, x + v_q s) - f_q(t, x + v_q s)) ds.$$

Après la translation $x \mapsto x - v_q t$, on obtient

$$f_q(t + \Delta t, x + v_q \Delta t) = f_q(t, x) + \int_t^{t+\Delta t} \frac{1}{\tau} (f_{eq,q}(s, x - v_q(t-s)) - f_q(t, x - v_q(t-s))) ds.$$

En approchant l'intégrale par la formule du rectangle à gauche, on trouve l'approximation

$$f_q(t + \Delta t, x + v_q \Delta t) \approx f_q(t, x) + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,q}(t, x) - f_q(t, x)). \quad (2.44)$$

La seconde idée majeure des méthodes LBM est alors de se donner une grille cartésienne en espace à pas constant Δx , telle que pour tout point x de la grille, le point $x + v_q \Delta t$ soit encore un point de la grille. L'approximation ci-dessus permet ainsi de faire évoluer les valeurs de f_q sur la grille sans aucune interpolation, ce qui donne une grande rapidité à la méthode.

Plus précisément, notons $x_{i,j} = (i\Delta x, j\Delta x)$ un point de la grille. On souhaite que pour tout couple (i, j) et pour tout entier q , il existe un autre couple (i', j') tel que l'on ait $x_{i,j} + v_q \Delta t = x_{i',j'}$. Pour simplifier ce problème, on va même demander que le point $x_{i',j'}$ soit un point immédiatement voisin de $x_{i,j}$. En tenant compte du fait que les vitesses v_q sont toutes disposées comme sur la figure 2.1, on voit facilement que cela est possible si, et seulement si, Δt et Δx sont liés par la relation

$$\Delta x = c\Delta t \quad (2.45)$$

où $c = c_s \sqrt{3}$ est appelée vitesse du son du réseau. Il suffit par exemple de considérer la vitesse $v_1 = c_s \sqrt{3} (1, 0)$: cette vitesse étant horizontale dirigée vers la droite, on souhaite alors que $x_{i,j} + v_1 \Delta t = x_{i+1,j}$, ce qui équivaut à $i\Delta x + c_s \sqrt{3} \Delta t = (i+1)\Delta x$. Cela donne bien la relation annoncée, et on peut vérifier qu'il en est de même avec les 6 autres vitesses non nulles.

Pour finir, on définit donc $f_{i,j,q}^n$ l'approximation de $f_q(n\Delta t, x_{i,j})$ en remplaçant la formule approchée (2.44) par la relation exacte

$$f_{i_q, j_q, q}^{n+1} = f_{i, j, q}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq, i, j, q}^n - f_{i, j, q}^n), \quad (2.46)$$

où $(i_q, j_q) = (i, j) + v_q / (c_s \sqrt{3})$ est le couple d'indices du point de la grille $x_{i,j} + v_q \Delta t$. Mais

il est plus clair d'écrire directement les 9 relations correspondantes :

$$\begin{aligned}
f_{i,j,0}^{n+1} &= f_{i,j,0}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,0}^n - f_{i,j,0}^n), \\
f_{i+1,j,1}^{n+1} &= f_{i,j,1}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,1}^n - f_{i,j,1}^n), \\
f_{i,j+1,2}^{n+1} &= f_{i,j,2}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,2}^n - f_{i,j,2}^n), \\
f_{i-1,j,3}^{n+1} &= f_{i,j,3}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,3}^n - f_{i,j,3}^n), \\
f_{i,j-1,4}^{n+1} &= f_{i,j,4}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,4}^n - f_{i,j,4}^n), \\
f_{i+1,j+1,5}^{n+1} &= f_{i,j,5}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,5}^n - f_{i,j,5}^n), \\
f_{i-1,j+1,6}^{n+1} &= f_{i,j,6}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,6}^n - f_{i,j,6}^n), \\
f_{i-1,j-1,7}^{n+1} &= f_{i,j,7}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,7}^n - f_{i,j,7}^n), \\
f_{i+1,j-1,8}^{n+1} &= f_{i,j,8}^n + \Delta t \frac{1}{\tau} (f_{eq,i,j,8}^n - f_{i,j,8}^n),
\end{aligned}$$

où la fonction d'équilibre vaut

$$f_{eq,i,j,q}^n = \rho_{i,j}^n \left(1 + \frac{u_{i,j}^n \cdot v_q}{c_s^2} \right),$$

et les moments valent

$$\rho_{i,j}^n = \sum_{q=0}^9 f_{i,j,q}^n \omega_q \quad \text{et} \quad \rho_{i,j}^n u_{i,j}^n = \sum_{q=0}^9 v_q f_{i,j,q}^n \omega_q. \quad (2.47)$$

Cette méthode s'interprète donc comme une méthode particulière sur réseau : on fait se déplacer des particules de noeuds en noeuds, et on tient compte d'une interaction entre ces particules par le terme de relaxation. Grâce à l'utilisation de ce réseau, la phase de transport est faite par de simples translation de tableau, contrairement à la plupart des méthodes usuelles qui nécessitent toujours une part d'interpolation (différences finies, volumes finis, éléments finis). C'est principalement cet aspect qui donne une grande rapidité à la méthode.

Cependant, le fait d'avoir discrétisé le temps et l'espace nécessite de revoir la relation (2.38) : celle-ci doit en effet être modifiée pour tenir compte de la diffusion numérique engendrée par le schéma, comme nous le montrons ci-dessous.

5.2 Analyse

Comme pour l'analyse de convergence de l'équation BGK vers les équations de Stokes, nous commençons par une adimensionnalisation, en utilisant les mêmes grandeurs caractéristiques. Le pas de la grille cartésienne adimensionné est $\Delta x' = \Delta x/x_*$, le pas de temps

est $\Delta t' = \Delta t/t_*$ où nous rappelons que $t_* = x_*/u_*$, avec u_* la vitesse caractéristique. Les vitesses discrètes adimensionnées sont $v'_q = v_q/c_s$. Nous noterons $f'_{i,j,q} = f_{i,j,q}^n/\rho_*$ la distribution adimensionnée : celle-ci est censée approcher $f'(n\Delta t', i\Delta x', j\Delta x', v'_q)$. Enfin, notons que les grandeurs macroscopiques adimensionnées sont

$$\rho_{i,j}^m = \sum_{q=0}^9 f_{i,j,q}^m \omega_q \quad \text{et} \quad \varepsilon \rho_{i,j}^m u_{i,j}^m = \sum_{q=0}^9 v'_q f_{i,j,q}^m \omega_q.$$

Avec ces nouvelles variables, le schéma s'écrit

$$f'_{i_q, j_q, q}{}^{m+1} = f'_{i,j,q}{}^m + \Delta t' \frac{1}{\varepsilon^2} (f'_{eq, i, j, q}{}^m - f'_{i, j, q}{}^m), \quad (2.48)$$

où (i_q, j_q) est le couple d'indices du point de la grille $x'_{i,j} + v'_q \frac{\Delta t'}{\varepsilon}$.

Nous devons ensuite faire une analyse de consistance de ce schéma. Nous considérons tout d'abord une fonction f' qui vérifie la relation (2.48) de façon exacte en tout point de discrétisation, soit

$$f'(t' + \Delta t', x' + v' \frac{\Delta t'}{\varepsilon}, v') = f'(t', x', v') + \Delta t' \frac{1}{\varepsilon^2} (f'_{eq}(t', x', v') - f'(t', x', v')).$$

Nous faisons ensuite un développement de Taylor de cette relation autour du point (t', x') en supposant $\Delta t'$ et $\Delta x'$ petits. Pour rendre ce développement plus lisible, faisons apparaître $\Delta x'$ en notant que d'après (2.45) et l'adimensionnement choisi, on a

$$\Delta t' = \frac{\Delta t}{t_*} = \frac{\Delta x/c}{t_*} = \frac{\Delta x/c}{x_*/u_*} = \frac{u_* \Delta x'}{c_s \sqrt{3}} = \text{Ma} \frac{\Delta x'}{\sqrt{3}} = \varepsilon \frac{\Delta x'}{c'},$$

où $c' = \sqrt{3}$ est la vitesse du son du réseau adimensionnée. On a alors

$$f'(t' + \Delta t', x' + v' \frac{\Delta x'}{c'}, v') = f'(t', x', v') + \Delta t' \frac{1}{\varepsilon^2 \tau'} (f'_{eq}(t', x', v') - f'(t', x', v')).$$

En divisant par $\Delta t'$ et en développant le premier terme de cette relation à l'ordre 4, nous obtenons alors :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\Delta t'} \left(f' + \Delta t' \partial_{v'} f' + \frac{\Delta t'^2}{2} \partial_{v'v'} f' + \frac{\Delta t'^3}{6} \partial_{v'v'v'} f' \right. \\ & + \Delta x' \frac{v'}{c'} \cdot \nabla_{x'} f' + \frac{\Delta x'^2}{2} D_{x'}^2 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) + \frac{\Delta x'^3}{6} D_{x'}^3 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\ & + \Delta t' \Delta x' \frac{v'}{c'} \cdot \nabla_{x'} \partial_{v'} f' \\ & + \frac{\Delta t'^2 \Delta x' v'}{2} \cdot \partial_{v'v'} \nabla_{x'} f' + \frac{\Delta t' \Delta x'^2}{2} D_{x'}^2 \partial_{v'} f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\ & \left. + O(\Delta t'^4) + O(\Delta t'^3 \Delta x') + O(\Delta t'^2 \Delta x'^2) + O(\Delta t' \Delta x'^3) + O(\Delta x'^4) - f' \right) \\ & = \frac{1}{\varepsilon^2} (f'_{eq} - f'). \end{aligned}$$

Dans ce développement, nous avons noté $D_{x'}^2$, et $D_{x'}^3$, les dérivées d'ordre 2 et 3 par rapport à x , de sorte que pour toute fonction ϕ de x , le développement de Taylor de ϕ à l'ordre 4 s'écrit $\phi(x+h) = \phi(x) + \nabla_x \phi(x) \cdot h + D_x^2 \phi(x)(h, h) + D_x^3 \phi(x)(h, h, h) + O(h^4)$. D'après la remarque précédente, nous pouvons remplacer tous les termes en $\Delta x'/\Delta t'$ par c'/ε , et nous trouvons

$$\begin{aligned}
& \partial_{t'} f' + \frac{\Delta t'}{2} \partial_{t't'} f' + \frac{\Delta t'^2}{6} \partial_{t't't'} f' \\
& + \frac{v'}{\varepsilon} \cdot \nabla_{x'} f' + \frac{c' \Delta x'}{2\varepsilon} D_{x'}^2 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) + \frac{\Delta x'^2 c'}{6\varepsilon} D_{x'}^3 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\
& + \Delta x' \frac{v'}{c'} \cdot \nabla_{x'} \partial_{t'} f' \\
& + \frac{\Delta t' \Delta x'}{2} \frac{v'}{c'} \cdot \partial_{t't'} \nabla_{x'} f' + \frac{\Delta x'^2}{2} D_{x'}^2 \partial_{t'} f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\
& + O(\Delta t'^3) + O(\Delta t'^2 \Delta x') + O(\Delta t' \Delta x'^2) + O(\Delta x'^3) + O(\Delta x'^3 c'/\varepsilon) \\
& = \frac{1}{\varepsilon^2} (f'_{eq} - f').
\end{aligned}$$

Il ne reste plus qu'à faire le développement de Hilbert sur cette relation pour vérifier que l'on obtient bien les équations de Stokes quand ε tend vers 0. Il y a cependant un point délicat à prendre en compte : dans cette analyse, on doit considérer la relation $\Delta t' = \varepsilon \Delta x'/c'$ qui montre que $\Delta t'$, $\Delta x'$ et ε sont liés. On ne peut donc faire tendre ε vers 0 en considérant $\Delta t'$ et $\Delta x'$ comme des paramètres constants. Nous avons déjà fait cette remarque pour éliminer les termes en $\Delta x'/\Delta t'$ dans le développement de Taylor précédent, mais il faut aller plus loin. En fait, il est naturel de supposer que $\Delta x' = \varepsilon$. En effet, cela est équivalent à $\Delta x = \varepsilon x_*$, c'est-à-dire que le pas de la grille est de l'ordre du libre parcours moyen : on a discrétisé l'équation BGK à l'échelle cinétique. Ainsi, la relation $\Delta t' = \varepsilon \Delta x'/c'$ implique $\Delta t' = \varepsilon^2/c'$. Le développement de Taylor précédent s'écrit maintenant

$$\begin{aligned}
& \partial_{t'} f' + \frac{\varepsilon^2}{2c'} \partial_{t't'} f' + \frac{\varepsilon^4}{6c'^2} \partial_{t't't'} f' \\
& + \frac{v'}{\varepsilon} \cdot \nabla_{x'} f' + \frac{c'}{2} D_{x'}^2 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) + \frac{\varepsilon c'}{6} D_{x'}^3 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\
& + \varepsilon \frac{v'}{c'} \cdot \nabla_{x'} \partial_{t'} f' \\
& + \frac{\varepsilon^3}{2c'} \frac{v'}{c'} \cdot \partial_{t't'} \nabla_{x'} f' + \frac{\varepsilon^2}{2} D_{x'}^2 \partial_{t'} f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\
& + O(\varepsilon^6) + O(\varepsilon^5) + O(\varepsilon^4) + O(\varepsilon^3) + O(\varepsilon^2) \\
& = \frac{1}{\varepsilon^2} (f'_{eq} - f').
\end{aligned}$$

Finalement, il s'agit d'un développement à l'ordre deux en ε seulement, et nous avons donc

$$\begin{aligned}
& \partial_{t'} f' + \frac{v'}{\varepsilon} \cdot \nabla_{x'} f' + \frac{c'}{2} D_{x'}^2 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \\
& + \frac{\varepsilon c'}{6} D_{x'}^3 f' \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) + \varepsilon \frac{v'}{c'} \cdot \nabla_{x'} \partial_{t'} f' + O(\varepsilon^2) \\
& = \frac{1}{\varepsilon^2} (f'_{eq} - f').
\end{aligned}$$

Nous pouvons à présent reprendre les différentes étapes du développement de Hilbert détaillées section 3.3. On voit facilement que les résultats ne changent que pour la dernière étape, c'est-à-dire celle concernant les termes en ε^1 . Ces termes donnent la relation (2.27) avec un terme en plus :

$$\partial_{t'} f'_1 + v' \cdot \nabla_{x'} f'_2 + \frac{c'}{2} D_{x'}^2 f'_1 \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) = f'_{eq,3} - f'_3. \quad (2.49)$$

Les contraintes de moments égaux pour $f'_{eq,3}$ et f'_3 donnent les deux relations

$$\begin{aligned} \left\langle \left(\partial_{t'} f'_1 + v \cdot \nabla_{x'} f'_2 + \frac{c'}{2} D_{x'}^2 f'_1 \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) \right) M_0 \right\rangle &= 0, \\ \langle v (\partial_{t'} f'_1 + v \cdot \nabla_{x'} f'_2 + \frac{c'}{2} D_{x'}^2 f'_1 \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) M_0) \rangle &= 0. \end{aligned}$$

Sachant que $f'_1 = \rho'_1 + U'_1 \cdot v$ avec ρ'_1 constant et $\nabla_{x'} \cdot U'_1 = 0$ et que $f'_2 = \rho'_2 + U'_2 \cdot v - v \cdot \nabla_{x'} (U'_1 \cdot v)$, on peut réduire ces deux relations. La première donne toujours $\nabla_{x'} \cdot U'_2 = 0$. Pour la deuxième, on peut réutiliser les calculs déjà fait pour trouver

$$\partial_{t'} U'_1 + \nabla_{x'} \rho'_2 - \Delta_{x'} U'_1 + \langle v' \left(\frac{c'}{2} D_{x'}^2 f'_1 \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) M_0 \right) \rangle = 0.$$

On retrouve donc l'équation d'évolution de Stokes de la vitesse, mais avec un terme supplémentaire, due à la discrétisation en temps et en espace. Pour calculer ce terme, passons en notation indicielle pour trouver

$$\begin{aligned} \langle v \left(\frac{c'}{2} D_{x'}^2 f'_1 \left(\frac{v'}{c'}, \frac{v'}{c'} \right) M_0 \right) \rangle &= \frac{1}{2c'} \langle v'_i \partial_{x'_k} \partial_{x'_i} f'_1 v'_k v'_i M_0 \rangle \\ &= \frac{1}{2c'} \langle v'_i \partial_{x'_k} \partial_{x'_i} (U'_1 \cdot v') v'_k v'_i M_0 \rangle \\ &= \frac{1}{2c'} \langle v'_i \partial_{x'_k} \partial_{x'_i} U'_{j,1} v'_j v'_k v'_i M_0 \rangle \\ &= \frac{1}{2c'} \langle v'_i v'_j v'_k v'_i M_0 \rangle \partial_{x'_k} \partial_{x'_i} U'_{j,1} \\ &= \frac{1}{2c'} \Delta_{x'} U'_1, \end{aligned}$$

en utilisant à nouveau la formule établie dans l'annexe 2.2 page 125. Ainsi, le terme supplémentaire ne fait que modifier les équations de Stokes à travers la valeur de la viscosité :

$$\partial_{t'} U'_1 + \nabla_{x'} \rho'_2 = \left(1 - \frac{1}{2c'} \right) \Delta_{x'} U'_1.$$

Nous revenons ensuite aux variables dimensionnelles (voir la section 3.4) pour trouver les équations

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot u_1 &= 0 \\ \partial_t u_1 + \nabla_x P_2 &= \nu \Delta_x u_1, \end{aligned}$$

où la viscosité vaut $\nu = \frac{x_*^2}{t_*} (1 - \frac{1}{2c'})$. Pour retrouver la forme habituellement donnée dans la littérature LBM, rappelons tout d'abord la relation $\frac{x_*^2}{t_*} = c_s^2 \tau$ déjà obtenue section 3.4. Ainsi, la viscosité s'écrit $\nu = c_s^2 (\tau - \frac{\tau}{2c'})$. Par rapport aux équations de Stokes obtenues comme limite asymptotique du modèle BGK linéarisé (voir section 3.4), la viscosité est donc modifiée par le facteur $\frac{\tau}{2c'}$. Ce facteur peut être ré-écrit différemment en remarquant que l'hypothèse $\Delta x' = \varepsilon$ et la relation de réseau $\Delta x = c \Delta t$ impliquent $\frac{c \Delta t}{x_*} = \frac{\tau c_s}{x_*}$, et donc $c \Delta t = \tau c_s$, ce qui s'écrit encore $\Delta t = \frac{\tau}{c}$. Par conséquent, la viscosité s'écrit maintenant $\nu = c_s^2 (\tau - \frac{\Delta t}{2})$.

En conclusion, nous avons donc montré que le schéma LBM D2Q9 (2.46) est consistant avec les équations de Stokes

$$\begin{aligned} \nabla_x \cdot u_1 &= 0 \\ \partial_t u_1 + \nabla_x P_2 &= \nu \Delta_x u_1, \end{aligned}$$

où la viscosité est donc

$$\nu = c_s^2 (\tau - \frac{\Delta t}{2}) \quad (2.50)$$

au lieu de $\nu = c_s^2 \tau$ pour le modèle D2Q9 continu.

5.3 Résumé

Toute cette discussion a permis de montrer que pour résoudre les équations de Stokes (2.2), on peut donc utiliser le schéma LBM-D2Q9 (2.46). Les différents paramètres du schéma peuvent tous se déterminer ainsi :

- on fixe tout d'abord Δx , en fonction du nombre de mailles que l'on souhaite dans le domaine ;
- on choisit ensuite un pas de temps Δt : on prendra en général un pas de temps de la forme $\Delta t = \alpha \frac{\Delta x^2}{2\nu}$, avec α un coefficient plus petit que 1, comme pour les schémas explicites usuels, mais qu'il faut ici ajuster pour que le schéma reste stable ;
- ensuite on pose $c = \Delta x / \Delta t$ la "vitesse du son" du réseau, puis on pose $c_s = c / \sqrt{3}$;
- on définit enfin τ par (2.50), soit $\tau = \frac{\nu}{c_s^2} + \frac{\Delta t}{2}$.

On peut ainsi définir la distribution d'équilibre et le schéma (2.46) dans son ensemble. Le schéma permet alors de calculer en tout point du maillage la distribution f , ses moments $\rho = \sum f_q \omega_q$ et $\rho u = \sum v_q f_q \omega_q$. Finalement, la vitesse u_S et la pression dynamique p_S des équations de Stokes s'approchent par u et $c_s^2 \rho$ calculées par le schéma.

5.4 Discussion

Discutons tout d'abord des avantages de cette méthode. Tout d'abord, c'est une méthode explicite. Les méthodes usuelles nécessitent en général l'utilisation d'un solveur de Poisson pour assurer la contrainte de divergence nulle : ceci est souvent l'étape la plus coûteuse en temps calcul. Avec la méthode LBM, il n'y a pas de solveur de Poisson : le calcul se fait très localement, et se prête donc bien à une parallélisation massive. En outre, l'approximation lagrangienne sur un réseau permet de résoudre la phase de transport par un décalage de tableau : le transport par la vitesse v_1 par exemple se fait en décalant le tableau f d'une colonne vers la droite. Il n'a donc pas de calcul en nombre flottant pour cette opération,

et elle est alors extrêmement rapide. Un autre avantage est la facilité d'adapter la méthode LBM à d'autres modèles de mécanique des fluides : il suffit d'interpréter ceux-ci de façon cinétique, et on voit qu'en général, il suffit de modifier la fonction d'équilibre pour simuler le modèle voulu (voir à ce sujet le chapitre 7). Une limite importante reste malgré tout celle du nombre de Mach : les méthodes LBM usuelles sont limitées aux écoulements incompressibles et isothermes, mais des extensions ont été récemment proposées pour remédier à cela.

En ce qui concerne les inconvénients de la méthode, le plus évident est qu'il s'agit d'une méthode explicite, donc limitée à des pas de temps petits. L'analyse de la stabilité de LBM est assez peu claire (de nombreux auteurs travaillent encore sur le sujet) : on ne connaît ainsi pas de condition CFL au sens usuel. Cependant, il est raisonnable de prendre Δt de l'ordre de Δx^2 , comme dans toute méthode explicite. Si Δx est petit, une simulation peut donc nécessiter un nombre de pas de temps considérable : le calcul d'un écoulement avec couche limite peut ainsi être assez difficile avec une telle méthode.

6 Mise en oeuvre

Nous donnons ici quelques détails pour l'implémentation effective de la méthode LBM. Nous renvoyons au TP correspondant (voir chapitre 8) pour d'autres détails, en particulier pour la définition de la donnée initiale et le traitement des conditions aux limites.

6.1 Simplifications

En pratique, la méthode LBM n'est pas tout à fait programmée dans sa forme décrite chapitre 5. Tout d'abord, il est d'usage dans la communauté LBM d'utiliser des variables adimensionnées, ce que nous ne ferons pas ici. Ensuite, quelques petites astuces de reformulation permettent de diminuer encore le coût de calcul.

La principale astuce consiste à remarquer que le calcul de ρ et u par la formule (2.47) nécessite le produit par les poids ω_q pour chaque q , i , et j , à chaque pas de temps. Le temps calcul induit peut être éliminé en introduisant la distribution $g_{i,j,q}^n = f_{i,j,q}^n \omega_q$. Ainsi, en multipliant (2.46) par ω_q , on trouve le schéma

$$\begin{aligned}
g_{i,j,0}^{n+1} &= g_{i,j,0}^n + \eta(g_{eq,i,j,0}^n - g_{i,j,0}^n), \\
g_{i+1,j,1}^{n+1} &= g_{i,j,1}^n + \eta(g_{eq,i,j,1}^n - g_{i,j,1}^n), \\
g_{i,j+1,2}^{n+1} &= g_{i,j,2}^n + \eta(g_{eq,i,j,2}^n - g_{i,j,2}^n), \\
g_{i-1,j,3}^{n+1} &= g_{i,j,3}^n + \eta(g_{eq,i,j,3}^n - g_{i,j,3}^n), \\
g_{i,j-1,4}^{n+1} &= g_{i,j,4}^n + \eta(g_{eq,i,j,4}^n - g_{i,j,4}^n), \\
g_{i+1,j+1,5}^{n+1} &= g_{i,j,5}^n + \eta(g_{eq,i,j,5}^n - g_{i,j,5}^n), \\
g_{i-1,j+1,6}^{n+1} &= g_{i,j,6}^n + \eta(g_{eq,i,j,6}^n - g_{i,j,6}^n), \\
g_{i-1,j-1,7}^{n+1} &= g_{i,j,7}^n + \eta(g_{eq,i,j,7}^n - g_{i,j,7}^n), \\
g_{i+1,j-1,8}^{n+1} &= g_{i,j,8}^n + \eta(g_{eq,i,j,8}^n - g_{i,j,8}^n),
\end{aligned} \tag{2.51}$$

où la fonction d'équilibre vaut

$$g_{eq,i,j,q}^n = \omega_q \rho_{i,j}^n \left(1 + \frac{u_{i,j}^n \cdot v_q}{c_s^2} \right),$$

et les moments valent

$$\rho_{i,j}^n = \sum_{q=0}^8 g_{i,j,q}^n \quad \text{et} \quad \rho_{i,j}^n u_{i,j}^n = \sum_{q=0}^8 v_q g_{i,j,q}^n \quad (2.52)$$

et $\eta = \Delta t / \tau$.

En outre, on peut éviter l'utilisation systématique de $\sqrt{3}$ en posant

$$c_q = \frac{v_q}{c_s \sqrt{3}}.$$

Les composantes des « vitesses » c_q valent donc 0 ou ± 1 . La distribution d'équilibre s'écrit alors

$$g_{eq,i,j,q}^n = \omega_q \rho_{i,j}^n \left(1 + 3 \tilde{u}_{i,j}^n \cdot c_q \right),$$

où $\tilde{u}_{i,j}^n = \frac{u_{i,j}^n}{c_s \sqrt{3}}$ qui peut être calculée directement avec

$$\rho_{i,j}^n \tilde{u}_{i,j}^n = \sum_{q=0}^8 c_q g_{i,j,q}^n.$$

6.2 Version collision-transport

En général, le calcul de g^{n+1} se fait en deux étapes successives :

- tout d'abord, on calcule le second membre de (2.51), que l'on stocke dans g^n : c'est l'étape de collision, purement locale, qui peut être massivement parallélisée ;
- ensuite, on applique le schéma (2.51) en utilisant g^n qui contient maintenant le second membre : c'est l'étape de transport.

Pour clarifier cela, nous écrivons ci-dessous ces deux étapes pour la vitesse v_1 :

Collision.

$$g_{i,j,1}^n \leftarrow g_{i,j,1}^n + \eta (g_{eq,i,j,1}^n - g_{i,j,1}^n).$$

Transport.

$$g_{i+1,j,1}^{n+1} = g_{i,j,1}^n.$$

7 Extensions

Un des intérêts de la méthode LBM est sa grande souplesse : il est relativement aisé d'étendre la méthode à d'autres modèles physiques, pour peu que l'on puisse leur trouver une interprétation cinétique. Dans cette section, nous mentionnons quelques exemples qui peuvent être traités en exercice.

Exercice 2.3. Il n'est pas très difficile d'étendre la méthode présentée ici pour simuler les équations de Navier-Stokes incompressibles. Il suffit pour cela de savoir qu'on peut les obtenir en repartant de la linéarisation de l'équation BGK (2.5) menée jusqu'à l'ordre deux par rapport à Ma . La fonction d'équilibre associée est alors

$$M[\rho, u, T] = M[1, 0, T]\rho \left(1 + \frac{u \cdot v}{RT} + \frac{(u \cdot v)^2}{2(RT)^2} - \frac{\|u\|^2}{2RT} \right) + O(Ma^3).$$

L'objectif de cet exercice est alors de suivre pas à pas toute l'analyse précédente pour aboutir à la méthode LBM correspondante. Noter que la plupart des calculs sont inchangés.

Exercice 2.4. Étendre le schéma LBM pour résoudre les équations de Stokes (ou Navier-Stokes incompressibles) pour des écoulements 3D. Il faudra pour cela reprendre l'analyse des chapitres précédents en commençant par étendre le modèle D2Q9 vu chapitre 4 au cas 3D. Il faut donc construire un modèle D3Qn (avec n à déterminer), puis construire le schéma LBM associé, et enfin l'analyser.

Exercice 2.5. Proposer une extension de la méthode présentée dans cette partie au cas d'un fluide soumis à la gravité. Pour cela, donner tout d'abord les équations de Stokes correspondantes. Ensuite, rajouter un terme de force à l'équation BGK (voir pour cela le chapitre 4 consacré aux sprays). Approcher ensuite ce terme en remplaçant la distribution par la maxwellienne associée. Constater que cela rajoute un terme source à l'équation BGK linéarisée et suivre l'analyse faite dans ce chapitre pour aboutir au résultat.

Exercice 2.6. S'inspirer du chapitre 3 sur le transfert radiatif pour construire une méthode LBM pour approcher l'équation de la chaleur. On pourra consulter [6] à ce sujet, mais la méthode est présentée de façon légèrement différente.

8 TP : initiation à la méthode Boltzmann sur réseau

Le but de ce TP est de programmer la méthode de Boltzmann sur réseau présentée dans les chapitres précédents, afin de de simuler deux problèmes classiques de mécanique des fluides. Certains détails indispensables à la simulation, comme le traitement des conditions aux limites, sont donnés dans le TP.

8.1 Écoulement de Couette

Le but de cette partie est de résoudre le problème de Couette plan. On considère un fluide visqueux contenu entre deux plaques planes d'axe Ox , séparées d'une largeur H . La plaque supérieure est animée d'une vitesse horizontale u_w , alors que la plaque inférieure est fixe (voir figure 8.1). Au bout d'un certain temps, l'écoulement atteint un régime stationnaire. Si la vitesse u_w est faible, l'écoulement est bien décrit par les équations de Stokes suivantes :

$$\begin{aligned} \nabla \cdot u &= 0, \\ \nabla p &= \mu \Delta u, \end{aligned}$$

avec $x \in \mathbb{R}$, $y \in [-H/2, H/2]$, et les conditions aux limites $u(x, -H/2) = (0, 0)$ et $u(x, H/2) = (u_w, 0)$.

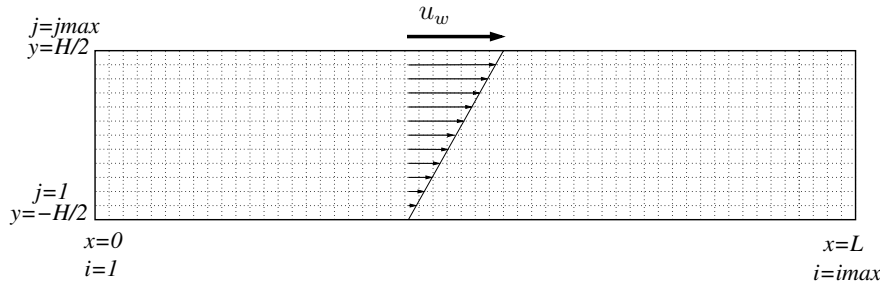


FIGURE 2.2 – Écoulement de Couette : géométrie, maillage, profil de vitesse.

En raison de l'unicité de la solution de ce problème, on peut montrer que celle-ci est indépendante de x , que u_y est partout nulle (l'écoulement est donc horizontal), et que le problème de Stokes se ramène aux équations

$$\mu \partial_{yy} u_x = 0 \quad \text{et} \quad \partial_y p = 0.$$

Il est maintenant facile de résoudre le problème et l'on trouve

$$u_x(y) = u_w \frac{y + H/2}{H} \quad \text{et} \quad p = \text{cte}.$$

L'écoulement présente donc un profil de vitesse horizontal et linéaire, alors que la pression est constante (cette constante n'est cependant pas définie de façon unique).

Nous allons maintenant résoudre ce problème avec la méthode de Boltzmann sur réseau D2Q9 vue en cours : l'écoulement sera donc simulé en 2D, de façon instationnaire. Avec un nombre d'itérations suffisamment grand, la solution numérique devrait tendre vers une bonne approximation de la solution stationnaire exacte. Dans ce TP, les valeurs physiques correspondent à celle de l'écoulement d'une huile du type huile d'olive à pression atmosphérique, à température de 20°C, dans un canal de largeur $H = 10$ cm, avec une vitesse de plaque 1 cm/s.

8.1.1 Prise en main du code

1. Téléchargez l'archive archive.tar.gz contenant :
 - trois fichiers de données `data_couette.txt`, `data_cylindre.txt`, et `maillage.dat` ;
 - trois modules `mod_precision.f90`, `mod_sorties.f90`, et `mod_ns.f90` ;
 - un makefile `Makefile` ;
 - un squelette de code du programme principal `lbm.f90` dans lequel vous devrez travailler.
2. Ouvrez tous ces fichiers et essayez de comprendre ce qu'ils contiennent.
3. Vous pouvez constater que ce code utilise les simplifications données dans le chapitre 6. Vérifiez sur le papier que ce code correspond bien au schéma donné dans ce chapitre (notez bien que la vitesse adimensionnée macroscopique $\tilde{u} = u/c_d$ reste notée u après adimensionnement dans le code).

8.1.2 Implémentation

Codez les étapes de collision, de transport, et de calcul des quantités macroscopiques dans le programme (voir le chapitre 6).

Attention : tout au long de l'écriture de votre programme, on conseille de compiler sans optimisation, avec l'option `-fbounds-check`, afin de détecter immédiatement les dépassements de tableau. Ce n'est qu'à la fin du TP que vous pourrez compiler en mode optimisé `-O3`.

8.1.3 Conditions aux limites

Tout d'abord, expliquez (par un travail sur le papier) pourquoi seules les mailles (i, j) des bords du domaine sont celles pour lesquelles l'étape de transport ne définit pas complètement $g_{q,i,j}^{n+1}$: pour chacun de ces bords (dénommés Est, Ouest, Sud, Nord), indiquez quelles sont les valeurs de q pour lesquelles $g_{q,i,j}^{n+1}$ n'a pas été définie.

Pour mettre à jour ces valeurs, on va utiliser les conditions aux limites.

Bords ouest et est Ces bords sont des frontières artificielles : pour reproduire un écoulement invariant dans la direction x qui aurait lieu dans un domaine infini dans cette même direction, il suffit d'imposer des conditions aux limites périodiques sur ces bords. Concrètement, les valeurs inconnues de g^{n+1} au bord ouest (donc celles pour $i = 1$ et j entre 1 et $jmax$, et pour $q = 1, 5, 8$), sont prises égales à celles, connues, de g^{n+1} au bord est (donc en $i = imax$, j entre 1 et $jmax$, et $q = 1, 5, 8$).

Trouvez la relation du même type pour définir les valeurs inconnues au bord est, puis programmez les conditions aux limites en ces deux bords.

Bord sud Ce bord est une paroi solide fixe : la seule condition physique est celle de non glissement qui indique que la vitesse sur ce bord doit être nulle.

Une des forces de la méthode de Boltzmann sur réseau est de pouvoir très facilement garantir cette propriété par la condition dite de « rebond » (ou « bounce back » en anglais) : on considère que les particules heurtant la paroi sont ré-émises avec une vitesse opposée (ne pas confondre avec la réflexion spéculaire qui inverse uniquement la composante normale de la vitesse). Ainsi, pour le bord sud par exemple, on imposera

$$g_{2,i,1}^{n+1} = g_{4,i,1}^{n+1} \quad g_{5,i,1}^{n+1} = g_{7,i,1}^{n+1} \quad g_{6,i,1}^{n+1} = g_{8,i,1}^{n+1}.$$

Avant de passer au codage de cette condition, vérifiez sur le papier que la relation $u_{y,i,1}^{n+1} = 0$ est bien assurée, mais pas la relation $u_{x,i,1}^{n+1} = 0$. En pratique, cela fonctionnera très bien quand même.

Codez ensuite cette condition pour toutes les mailles du bord sud.

Bord nord Ce bord est aussi une paroi solide, mais qui se déplace à la vitesse u_w . Cela peut être simulé avec la condition aux limites de Zou-He, qui permet d'imposer simplement une des composantes de la vitesse ou bien la densité au bord. Cette condition est déjà codée dans le programme : on commence par définir une densité de bord (notée `rhoZH` dans le

code), puis on définit les valeurs inconnues de la distribution en utilisant cette densité, la vitesse de paroi u_w , et les valeurs connues de la distribution.

8.1.4 Test du programme

Premier test Compilez votre programme, puis observez les résultats et répondez aux questions suivantes :

1. le schéma converge-t-il vers une solution stationnaire ? En combien d'itérations ?
2. le résultat est-il proche de la solution exacte ?
3. la solution est-elle bien 1D ? Pour cela, visualisez le champ de vitesse 2D avec paraview.

Sensibilité des paramètres Il est important de connaître la sensibilité de la méthode LBM aux divers paramètres du calcul. Faites les tests indiqués ci-dessous et commentez les résultats que vous obtenez :

1. augmentez progressivement la valeur de u_w ;
2. augmentez le nombre de mailles `jmax` ;
3. augmentez la valeur du coefficient `alpha`.

8.2 Écoulement autour d'un cylindre

On veut simuler à présent l'écoulement plan d'un fluide autour d'un obstacle fixe immergé dans le fluide : le domaine de calcul est un canal rectangulaire dans lequel entre le fluide par la frontière ouest (avec un profil de vitesse parabolique). Le fluide rencontre alors un cylindre immergé au milieu du canal, puis sort par la frontière est.

Lorsque la vitesse est suffisamment petite, l'écoulement atteint rapidement un régime stationnaire, solution des équations de Stokes, symétrique par rapport à l'axe du canal. Quand la vitesse augmente, si l'on tient compte des non-linéarités du modèle de Navier-Stokes, deux poches de recirculations apparaissent en aval du cylindre, mais l'écoulement reste stationnaire et symétrique. Avec une vitesse encore plus grande, ces poches se détachent et créent une succession de tourbillons alternés dans le sillage du cylindre. Ce phénomène est appelé « allées de Von Karmann ». L'écoulement n'est alors plus symétrique, ni stationnaire.

La géométrie du problème 2D et les paramètres de discrétisation sont donnés dans la figure ci-dessous. Le canal est de largeur $H = 10$ cm et de longueur $L = 50$ cm, et l'axe Ox passe par son milieu. Le cylindre (représenté par un disque en 2D) est de rayon $R = H/10$ cm et est placé en $(c_x, c_y) = (L/5, 0)$.

Nous allons voir que le code précédent permet, moyennant très peu de modifications, de simuler cet écoulement.

8.2.1 Obstacle

Ici, nous allons garder le même maillage cartésien, qui va donc remplir l'obstacle, contrairement aux approches plus classiques où le maillage épouse la frontière de l'obstacle (approche « body fitted »). Pour faire la différence entre le fluide et l'intérieur de l'obstacle, on va se donner un tableau « masque » d'entiers noté `obst` tel que `obst(i, j) = 1` si le noeud (i, j)

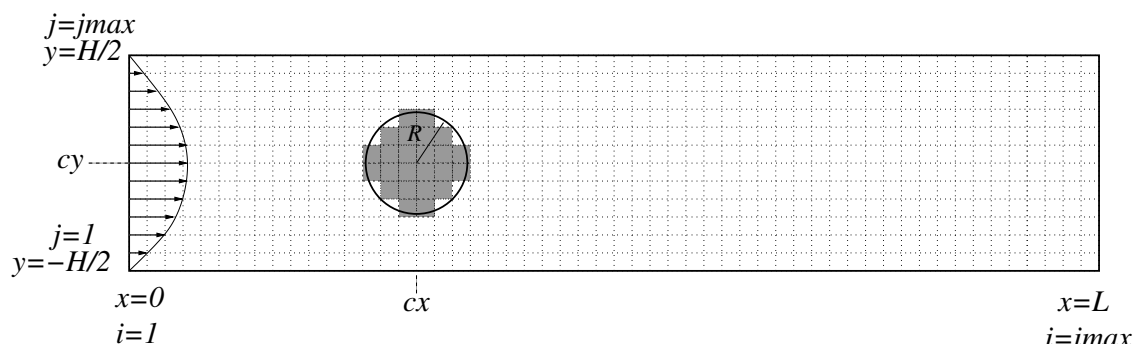


FIGURE 2.3 – Écoulement autour d'un cylindre : géométrie et paramètres de discrétisation

est extérieur au disque (on dira que le noeud est *fluide*), et $\text{obst}(i, j) = 0$ si le noeud est intérieur au disque (on dira que le noeud est *solide*). De cette façon, le disque est approché par un géométrie « en lego », ce qui est assez grossier quand le maillage n'est pas fin, mais cela sera suffisant ici. Cette approche a l'avantage de ne pas nécessiter de logiciel de maillage, et convient parfaitement aux méthodes de Boltzmann sur réseau.

1. décommentez les lignes de code définissant le tableau de masque qui permet de prendre en compte le cylindre ;
2. modifiez les lignes de lecture des données pour lire le fichier `data_cylindre.txt` ;
3. rajoutez un test dans le bloc des collisions : elles ne doivent être faites que dans le fluide (test sur la valeur de `obstacle(i, j)`) ;
4. modifiez le code pour faire une seule itération en temps, et une seule sortie fichier, puis visualisez le domaine de calcul et l'obstacle avec `paraview`.

8.2.2 Conditions aux limites

Bords nord et sud Ces bords sont des parois solides immobiles. Pour le bord sud, reprenez la condition aux limites de rebond utilisée dans le cas-test de Couette. Adaptez cette CL pour le bord nord.

Bord ouest En ce bord, on souhaite imposer un profil de vitesse parabolique (profil de Poiseuille), soit

$$u_x(y) = \left(\frac{2}{H}\right)^2 u_w \left(\left(\frac{H}{2}\right)^2 - y^2 \right), \quad \text{et} \quad u_y = 0.$$

Pour cela, on utilise la condition aux limites de Zou-He qui s'écrit pour tout j (avec

$i = 1$) :

$$\begin{aligned}
v_e &= \left(\frac{2}{H}\right)^2 u_w \left(\left(\frac{H}{2}\right)^2 - y_j^2 \right), \\
\rho_e &= (g_{0,i,j}^{n+1} + g_{2,i,j}^{n+1} + g_{4,i,j}^{n+1} + 2(g_{3,i,j}^{n+1} + g_{6,i,j}^{n+1} + g_{7,i,j}^{n+1}))/ (1 - v_e), \\
g_{1,i,j}^{n+1} &= g_{3,i,j}^{n+1} + \frac{2}{3}\rho_e v_e, \\
g_{5,i,j}^{n+1} &= g_{7,i,j}^{n+1} + \rho_e v_e / 6 - (g_{2,i,j}^{n+1} - g_{4,i,j}^{n+1}) / 2, \\
g_{8,i,j}^{n+1} &= g_{6,i,j}^{n+1} + \rho_e v_e / 6 + (g_{2,i,j}^{n+1} - g_{4,i,j}^{n+1}) / 2.
\end{aligned}$$

Notez bien que cette CL est définie seulement si v_e n'est pas égale à 1, de qui implique que la vitesse d'entrée adimensionnée u_w soit inférieure à 1. Cela peut nécessiter de réduire le pas de temps via le paramètre α (voir la section 8.2.5).

Programmez cette CL dans le code. Attention à la fraction $\frac{2}{3}$ qui doit être codée en réel et pas en entier !

Bord est Au bord est, on va imposer la densité initiale, ce qui peut là encore se faire avec la CL de Zou-He, qui s'écrit pour tout j (avec $i = i_{max}$) :

$$\begin{aligned}
\rho_e &= \rho_s, \\
v_e &= -1 + (g_{0,i,j}^{n+1} + g_{2,i,j}^{n+1} + g_{4,i,j}^{n+1} + 2(g_{1,i,j}^{n+1} + g_{5,i,j}^{n+1} + g_{8,i,j}^{n+1})) / \rho_e, \\
g_{3,i,j}^{n+1} &= g_{1,i,j}^{n+1} - \frac{2}{3}\rho_e v_e, \\
g_{6,i,j}^{n+1} &= g_{8,i,j}^{n+1} - \frac{\rho_e v_e}{6} - (g_{2,i,j}^{n+1} - g_{4,i,j}^{n+1}) / 2, \\
g_{7,i,j}^{n+1} &= g_{5,i,j}^{n+1} - \frac{\rho_e v_e}{6} + (g_{2,i,j}^{n+1} - g_{4,i,j}^{n+1}) / 2.
\end{aligned}$$

Programmez cette CL dans le code.

CL sur l'obstacle Ces bords se traitent différemment. Tout d'abord, il faut remarquer que dans l'étape de transport, les mailles qui ont pour voisines des mailles solides du disque ont été affectées par le transport de g^n venant de ces mailles solides. Comment est donc définie la distribution dans ces mailles ? Il suffit en fait de la définir conformément aux conditions aux limites de non glissement à la paroi.

On peut interpréter la phase de transport ainsi : les noeuds solides ont reçu des particules des noeuds fluides. Pour annuler la vitesse (ou de façon équivalente, le flux de masse) à la paroi, qui est située à l'interface entre les noeuds fluides et solides, il suffit alors d'inverser les vitesses de ces particules. Autrement dit, on va modifier les distributions des noeuds solides avec la même technique de rebond que celle utilisée sur les parois sud et nord, mais ici pour toutes les vitesses. On va alors utiliser l'algorithme suivant :

```

boucle en i,j
  si obst(i,j)=0 alors
    cl(0:8) = gn(0:8,i,j)

```

```

gnp1(0,i,j) = c1(0)
gnp1(1,i,j) = c1(3)
gnp1(2,i,j) = c1(4)
gnp1(3,i,j) = c1(1)
gnp1(4,i,j) = c1(2)
gnp1(5,i,j) = c1(7)
gnp1(6,i,j) = c1(8)
gnp1(7,i,j) = c1(5)
gnp1(8,i,j) = c1(6)

```

Codez alors cet algorithme.

8.2.3 Premier test

Lancez votre code pour un premier test, avec un temps maximum de simulation de 3000 s et une sortie toutes les 100 itérations (diminuez la fréquence des sorties si vous n'avez pas assez d'espace disque). Observez les résultats avec paraview en visualisant la norme du champ de vitesse, et éventuellement le champ de vecteurs. Commentez.

Vous pouvez faire varier légèrement le nombre de mailles pour voir son influence.

8.2.4 Adaptation du code pour simuler Navier-Stokes

Pour pouvoir simuler un écoulement avec une vitesse d'entrée plus grande, il faut modifier le code afin de prendre en compte les effets non-linéaires. Pour cela, il suffit de refaire l'analyse donnée en cours, en remplaçant le développement limité de la Maxwellienne d'ordre 1 par un développement à l'ordre 2. En suivant pas à pas tous les calculs, on trouve que la distribution d'équilibre du code doit être remplacée par

$$g_{eq,q}(\rho, u) = \omega_q \rho \left(1 + 3u \cdot c_q + \frac{9}{2}(u \cdot c_q)^2 - \frac{3}{2}\|u\|^2 \right).$$

Remplacez alors la distribution d'équilibre du code (dans les blocs initialisation et relaxation) par cette nouvelle distribution et relancez le code avec les mêmes paramètres que précédemment : vous devriez constater que la solution obtenue semble peu différente.

8.2.5 Tests à plus grande vitesse

En augmentant progressivement la vitesse d'entrée (passer de 2×10^{-4} à 4×10^{-4} , puis enfin à puis à 0.004 m.s^{-1}), observez l'apparition d'un poche de recirculation. Pour observer le détachement de tourbillons et l'apparition de l'allée de von Karman, il faut augmenter le temps de simulation à 4000 s. Attention, l'augmentation de la vitesse nécessite de diminuer le coefficient CFL α .

8.2.6 Autres calculs

Ensuite, amusez-vous ! : faite varier les paramètres pour observer le comportement de la méthode, changez la taille du canal, insérez d'autres obstacles, que vous pouvez même faire

bouger. Il suffit de modifier le test permettant de remplir le tableau `obst`, ce qui est très facile. C'est cette simplicité qui a rendu la méthode aussi populaire, en particulier pour les calculs d'écoulements en milieux poreux.

Transfert radiatif

Sommaire

1	Introduction	95
2	Modélisation cinétique de l'énergie de radiation	96
3	Radiation du corps noir	99
4	Équation de transport	102
5	Couplage avec l'évolution de la température du matériau . . .	105
6	Transfert radiatif dans un matériau opaque : limite de diffusion	106
7	Exercices	108

1 Introduction

Dans ce chapitre, qui s'inspire fortement de quelques parties du livre M. F. Modest [16], nous donnons quelques éléments de la théorie cinétique du transfert radiatif.

Le transfert radiatif (ou transfert par rayonnement) est le transport de chaleur induit par les ondes électromagnétiques. On peut expérimenter de nombreuses manifestation de ce phénomène dans la vie quotidienne : citons par exemple la forte et soudaine variation de température ressentie sur la peau lorsque un nuage vient à cacher le soleil lors d'une fraîche journée d'automne, ou encore la forte chaleur ressentie devant un feu de cheminée, ou bien tout simplement la couleur bleue du ciel.

Le transfert de chaleur peut se faire selon trois modes différents. Le premier est la "conduction". Comme nous l'avons vu en théorie cinétique des gaz, la chaleur est l'énergie d'agitation de ses molécules : celle-ci se transmet par collision aux autre molécules, et occasionne un flux de chaleur proportionnel au gradient de température (c'est la loi de Fourier (1.3) $q = -\kappa \nabla T$). Dans un solide, la conduction se fait de façon un peu similaire par transfert d'énergie de vibration (sous forme quantifiée) du réseau d'atomes constituant le solide. La loi de Fourier est là encore assez correcte. Le deuxième mode de transfert de chaleur dans un fluide est la "convection" : l'écoulement du fluide occasionne le transport d'une zone chaude vers une partie froide, ce qui induit un flux de chaleur. Ce flux est souvent modélisé par

une loi du type $q = h(T - T_{ref})$, qui dit que le flux est proportionnel à la différence de température entre le gaz et un milieu de référence.

Ces deux modes de transfert nécessitent la présence d'un matériau, et le flux de chaleur est grosso-modo proportionnel à une différence de température. Le troisième mode (le transfert de chaleur par rayonnement) est très différent : il est effectué par les ondes électromagnétiques (ou photons), et peut se faire sur de longues distances et dans le vide. Il est donc très important dans les applications spatiales. Les longueurs d'ondes les plus importantes dans ce cas vont de la lumière ultra-violette à l'infrarouge, en passant par le visible. Ces ondes ou photons transportent une énergie qui se transmet aux matériaux traversés, induisant ainsi leur échauffement par interaction lumière-matière. Ces matériaux ré-emettent alors des photons qui se transportent à nouveau. Une autre différence essentielle de ce mode de transfert est que le flux de chaleur est proportionnel à une différence de la puissance quatrième de la température : $q \approx T^4 - T_{ref}^4$. Le transfert par rayonnement est donc prépondérant lorsque la température est grande, comme dans les phénomènes de combustion (feux, moteurs, etc.), en ingénierie nucléaire, ou en ingénierie spatiale (rentrée atmosphérique). Il est aussi d'une importance capitale dans les problèmes liés au rayonnement solaire (effet de serre, panneaux solaires, réchauffement climatique, etc.).

Le but de ce chapitre est de donner quelques éléments de la théorie du transfert de chaleur par rayonnement, en particulier de sa modélisation par la théorie cinétique, utilisée dans la plupart des applications en ingénierie et en sciences du climat.

2 Modélisation cinétique de l'énergie de radiation

Nous étudions ici un modèle cinétique décrivant le transfert de chaleur par rayonnement électromagnétique. Dans ce modèle, on suppose que la longueur caractéristique du problème (la distance entre deux atomes du milieu traversé) est bien plus grande que la longueur d'onde des ondes électromagnétiques du rayonnement : on peut donc assimiler le rayonnement à des particules, les *photons*, qui se déplacent en ligne droite (approximation dite de l'optique géométrique).

Un photon sera défini par sa position $x \in \mathbb{R}^3$ et son impulsion $p \in \mathbb{R}^3$. La population de photons est décrite par la fonction de distribution $f(t, x, p)$ qui est une densité numérique dans l'espace position-impulsion. Autrement dit, le nombre de photons en $x \pm dx$ d'impulsion $p \pm dp$ à l'instant t est

$$dn = f(t, x, p) dx dp. \quad (3.1)$$

Noter que contrairement à la dynamique des gaz, on ne parle pas ici de densité de masse de photons mais bien de densité numérique. La raison en est simple : les photons n'ont pas de masse.

Tous les photons sont animés d'une vitesse de même intensité constante (notée c , la vitesse de la lumière) : seule la direction de cette vitesse varie, et elle est notée $\Omega \in S^2$. À chaque photon est aussi associée une fréquence $\nu > 0$, qui n'est autre que la fréquence de l'onde électromagnétique correspondante. La relation entre toutes ces variables et l'impulsion est la suivante :

$$p = \frac{h\nu}{c}\Omega,$$

où h est la constante de Planck. Les photons sont aussi porteur d'une énergie définie par

$$e = h\nu.$$

Remarque 3.1. La vitesse de la lumière c dépend en fait du milieu traversé, et peut être reliée à la vitesse de la lumière dans le vide c_0 par la formule $c = c_0/n$, où n est l'indice de réfraction du milieu (qui vaut 1 pour le vide). Pour la plupart des gaz, n est proche de 1 et c est donc proche de c_0 . Ce n'est pas le cas dans les solides en général.

2.1 Intensité spécifique

On peut alors décrire la population de photons par une autre fonction de distribution $N(t, x, \Omega, \nu)$, définie de sorte que le nombre de photons en $x \pm dx$, dont la vitesse est dans la direction $\Omega \pm d\Omega$, et la fréquence est $\nu \pm d\nu$, à l'instant t soit

$$dn = N(t, x, \Omega, \nu) dx d\Omega d\nu.$$

Ce nombre est le même que celui défini par (3.1) : en utilisant le changement de variables $(\Omega, \nu) \mapsto p = \frac{h\nu}{c}\Omega$ (qui est une sorte de changement de variables en coordonnées polaires), on trouve $dp = (h^3\nu^2/c^2)d\nu d\Omega$, et donc $N = (h^3\nu^2/c^3)f$.

Cependant, la représentation la plus utilisée n'est pas une densité numérique de photons mais plutôt une *densité d'énergie radiative* que l'on définit comme suit. On s'intéresse à l'énergie dE reçue pendant dt par une surface élémentaire dA de la part des photons qui la traverse, ces photons ayant une direction $\Omega \pm d\Omega$ et une fréquence $\nu \pm d\nu$. Or un photon de fréquence ν transporte une énergie égale à $h\nu$. Donc l'énergie considérée est égale à l'énergie des photons contenus dans le cylindre de volume $dx = (-\Omega \cdot n)c dt dA$ (voir figure 3.1). Comme il y a $dn = N(t, x, \Omega, \nu) dx d\Omega d\nu$ photons dans ce cylindre, leur énergie est donc

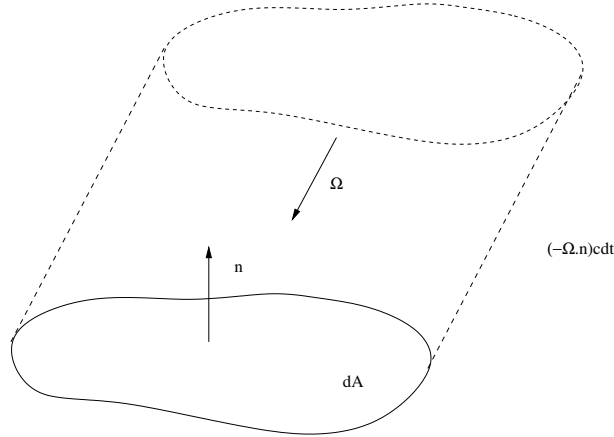


FIGURE 3.1 – Flux de photons sur une surface dA

$$dE = dn \times h\nu = N(t, x, \Omega, \nu)(-\Omega \cdot n)c dt dA d\Omega d\nu \times h\nu.$$

On définit alors l'*intensité spécifique* (ou spectrale) la quantité $I(t, x, \Omega, \nu) = N(t, x, \Omega, \nu)h\nu c$, de sorte que l'énergie reçue par la surface dA s'écrive

$$dE = I(t, x, \Omega, \nu) dt dA d\Omega d\nu \times (-\Omega \cdot n). \quad (3.2)$$

Une analyse dimensionnelle de la relation précédente montre que l'unité de I est J.m^{-2} : c'est donc une énergie par unité de surface, que l'on appelle aussi intensité du rayonnement (c'est aussi une énergie par unité de temps, de surface, et de fréquence, soit $\text{J.s}^{-1}.\text{m}^{-2}.\text{Hz}^{-1}$). C'est l'outil principal de description des photons dans la théorie du transfert radiatif ; I joue à peu près le même rôle que la fonction de distribution $f(t, x, v)$ en dynamique des gaz.

2.2 Flux de chaleur

Le flux de chaleur due aux radiations arrivant sur une surface est la quantité d'énergie reçue par cette surface, par seconde et par mètre carré. Celle-ci s'obtient en divisant (3.2) par $dAdt$, puis en intégrant sur toutes les directions dirigées vers la surface (de normale n) et toutes les fréquences. On obtient le flux

$$\phi_{inc} = \int_{\Omega \cdot n < 0} (-\Omega \cdot n) I(t, x, \Omega, \nu) d\Omega d\nu.$$

La surface émet aussi des radiations, et le flux de chaleur correspondant s'obtient de la même façon, mais en intégrant sur toutes les directions opposées, soit

$$\phi_{em} = \int_{\Omega \cdot n > 0} \Omega \cdot n I(t, x, \Omega, \nu) d\Omega d\nu.$$

Le flux de chaleur net est la différence entre ces deux flux émis et incident, soit $\phi = \phi_{em} - \phi_{inc}$. On peut l'écrire sous la forme

$$\begin{aligned} \phi &= \left(\int \Omega I(t, x, \Omega, \nu) d\Omega d\nu \right) \cdot n \\ &= q_{rad} \cdot n, \end{aligned}$$

où

$$q_{rad}(t, x) = \int \Omega I(t, x, \Omega, \nu) d\Omega d\nu \quad (3.3)$$

est le vecteur flux de chaleur. C'est le moment d'ordre un par rapport à Ω de la distribution I .

2.3 Pression de radiation

Pour calculer la force exercée par les photons sur une surface, il suffit d'utiliser le même raisonnement que pour les gaz (voir 6) en faisant un bilan de transfert d'impulsion. Soit une surface d'aire dA et de normale n . Le nombre de photons de direction de propagation Ω qui vont heurter la surface durant dt secondes est $dn = N dx d\Omega d\nu$, où N est la densité numérique de photons (voir section 2.1) et $dx = (-\Omega \cdot n) c dt dA$ est le volume du cylindre contenant les photons en question (voir la figure 3.1 et la section précédente). L'impulsion d'un de ces photons est $p = \frac{h\nu}{c} \Omega$, et l'impulsion de tous les photons de même direction est donc

$$dImp = \frac{h\nu}{c} \Omega N (-\Omega \cdot n) c dt dA d\Omega d\nu.$$

Or on a vu que la relation entre densité numérique de photons et intensité spécifique s'écrit $N = I(t, x, \Omega, \nu)/(h\nu c)$, donc la relation précédente donne

$$dImp = \frac{1}{c} \Omega I(-\Omega \cdot n) dt dAd\Omega d\nu.$$

L'impulsion incidente totale s'obtient en intégrant sur toutes les directions incidentes pour trouver

$$Imp_{inc} = \frac{1}{c} \left(\int_{\Omega \cdot n < 0} \int_0^{+\infty} \Omega(-\Omega \cdot n) I d\nu d\Omega \right) dAdt.$$

La force exercée par la surface sur les photons s'obtient en faisant la différence de l'impulsion des photons ré-émis et de l'impulsion des photons incidents, divisée par dt . Si l'on suppose que la surface ne ré-émet aucun photons, alors on trouve que la force s'écrit

$$F_{surface \rightarrow photons} = -\frac{1}{c} \left(\int_{\Omega \cdot n < 0} \int_0^{+\infty} \Omega(-\Omega \cdot n) I d\nu d\Omega \right) dA.$$

La force exercée par les photons sur la surface est l'opposée de $F_{surface \rightarrow photons}$:

$$F_{photons \rightarrow surface} = \frac{1}{c} \left(\int_{\Omega \cdot n < 0} \int_0^{+\infty} \Omega(-\Omega \cdot n) I d\nu d\Omega \right) dA.$$

Cette force peut s'écrire sous la forme $F = PndA$ où P est le tenseur de pression défini par

$$P = -\frac{1}{c} \int_{\Omega \cdot n < 0} \int_0^{+\infty} \Omega \otimes \Omega I d\nu d\Omega.$$

La force normale exercée par les photons est $F_n = F \cdot n$, et l'on trouve

$$F_n = -\frac{1}{c} \left(\int_{\Omega \cdot n < 0} \int_0^{+\infty} (\Omega \cdot n)^2 I d\nu d\Omega \right) dA.$$

Le signe $-$ montre que cette force normale est opposée à n , ce qui est attendu. La pression correspondante est le scalaire p tel que $|F_n| = pdA$, soit

$$p = \frac{1}{c} \int_{\Omega \cdot n < 0} \int_0^{+\infty} (\Omega \cdot n)^2 I d\nu d\Omega. \quad (3.4)$$

Exercice 3.1. Montrer que si la surface est parfaitement réfléchissante, la pression est alors

$$p = \frac{1}{c} \int_{S^2} \int_0^{+\infty} (\Omega \cdot n)^2 I d\nu d\Omega$$

3 Radiation du corps noir

Lorsqu'une onde rencontre un matériau, celui-ci peut réfléchir cette onde en partie. Une autre partie de l'onde pénètre dans le matériau, est absorbée en partie par les atomes (qui voient leurs niveaux d'énergie augmenter), et est donc atténuée. Si l'onde ne ressort pas du

matériau, celui-ci est dit opaque. Si l'onde n'est pas atténuée, le matériau est dit transparent. Les propriétés de transparence ou d'opacité dépendent du matériau lui-même et de son épaisseur.

Quand les atomes excités par les photons reviennent à leur niveau d'énergie initial, il émettent à leur tour des photons, dont les caractéristiques dépendent de la température du matériau.

La couleur d'une lumière correspond à une longueur d'onde donnée : par exemple, la couleur verte correspond à une longueur d'onde entre 510 et 540 nm. La couleur blanche est celle d'une lumière composée d'ondes de tout le spectre visible au moins (de 380 à 700 nm). La couleur d'un objet est donc due à la lumière qu'il émet : celle qu'il réfléchit, et celle qu'il rayonne. Pour un objet à une température normale, le rayonnement est émis dans des longueurs d'ondes plus basses que la lumière visible. La longueur d'onde de la lumière réfléchie donne sa couleur à l'objet. Par exemple : un objet vert (comme une plante) absorbe toutes les longueurs d'onde de la lumière visible et ne réfléchit que celle correspondant au vert. Un objet très chaud peut rayonner dans la lumière visible, comme par exemple une fer chauffé "à blanc".

Un objet qui nous paraît noir ne réfléchit donc aucune longueur d'onde dans la lumière visible, mais il peut réfléchir dans d'autres longueurs d'ondes. Un "corps noir" est un objet idéal qui ne réfléchit aucune longueur d'onde. Il absorbe donc une quantité maximale d'énergie, et l'on peut montrer qu'il en ré-émet aussi une quantité maximale. Cet objet permet de classer les autres types de surface et est d'une grande importance dans la théorie du transfert radiatif.

Attention, un corps noir peut être très lumineux ! La lumière rayonnée par le corps dépend en effet de sa température, et donc il peut émettre dans la lumière visible s'il est suffisamment chaud. Ainsi, le soleil se comporte comme un corps noir à la température de 5777 K.

M. Planck a montré que l'énergie rayonnée par un corps noir à la température T pour une longueur d'onde ν (c.-à-d. l'intensité spécifique du rayonnement de fréquence ν) est $I = B(T, \nu)$, définie par

$$B(T, \nu) = \frac{2h\nu^3 n^2}{c^2 (e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1)}, \quad (3.5)$$

où k est la constante de Boltzmann (Planck a utilisé des arguments de la théorie cinétique de Boltzmann pour arriver à ce résultat), n est l'indice de réfraction du milieu dans lequel est émis l'onde, et c est la vitesse de la lumière dans le vide. Cette distribution est isotrope (elle ne dépend pas de la direction des photons ré-émis). Elle est souvent appelée distribution planckienne. On considère que tout corps à la température T émet des photons selon la distribution Planckienne $B(T, \nu)$.

L'intensité totale du corps noir s'obtient alors aisément :

$$\begin{aligned} B(T) &= \int_0^{+\infty} \int_{S^2} B(T, \nu) d\Omega d\nu \\ &= \sigma T^4, \end{aligned} \quad (3.6)$$

où $\sigma = \sigma_{SB}/\pi$, avec $\sigma_{SB} = 5.670 \cdot 10^{-8}$ la constante de Stefan-Boltzmann. Cette relation indique que le flux de chaleur due à la radiation émise par un corps noir est proportionnel à sa température à la puissance 4 : ce flux est donc grand pour les grandes températures.

Exercice 3.2. (d'après [16]). Le projet japonais Ikaros, réalisé en 2010, consistait à démontrer la faisabilité d'un vol spatial au moyen d'une "voile solaire" : un petit satellite est muni d'une grande voile, et la pression radiative solaire est censée lui permettre de se déplacer à volonté. Dans cet exercice, nous proposons d'utiliser les formules précédentes afin de déterminer la surface nécessaire de la voile pour obtenir une poussée de 1 mN. Pour cela, on suppose que le soleil se comporte comme un corps noir à la température $T_s = 5777$ K. La distance entre le soleil et le satellite est approximativement la même qu'entre le soleil et la Terre, soit en moyenne $L = 1.496 \cdot 10^{11}$ m, et le soleil a un rayon de $R = 6.9610^8$ m.

1. Quelles sont les directions Ω des photons impactant le satellite ? Il est conseillé d'utiliser la représentation de Ω en variables sphériques (ϕ, θ) , avec l'angle azimutal ϕ mesuré à partir de l'axe soleil-satellite.
2. Calculer la pression radiative solaire exercée sur la voile du satellite. Pour simplifier, on supposera celle-ci parfaitement absorbante.
3. En déduire la surface nécessaire de la voile.

Solution. Les rayons lumineux provenant du soleil et atteignant le satellite sont tous contenus dans un cône C d'axe soleil-satellite (noté x), et de génératrices qui passent par le satellite et sont tangentes au soleil (voir figure 3.2). L'angle α entre l'axe x et une de ces génératrices est tel que $\sin \alpha = R/L \approx 4.65 \cdot 10^{-3}$. En représentation sphérique, on pose $\Omega = (\cos \phi, \sin \phi \cos \theta, \sin \phi \sin \theta)$ où ϕ est l'angle entre l'axe x et Ω , et θ est l'angle entre la projection de Ω sur un plan perpendiculaire à x et un deuxième axe y contenu dans ce plan. Toute la sphère unité est représentable avec $\phi \in [0, \pi]$ et $\theta \in [0, 2\pi]$. Le cône recherché est alors $C = \{-\Omega, \text{ où } \Omega = (\cos \phi, \sin \phi \cos \theta, \sin \phi \sin \theta), \text{ avec } \phi \in [0, \alpha] \text{ et } \theta \in [0, 2\pi]\}$.

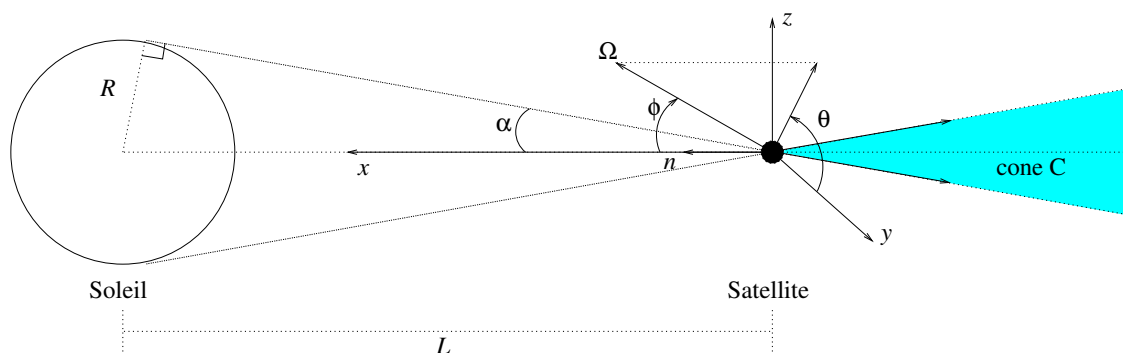


FIGURE 3.2 – Directions des photons impactant un satellite

La pression radiative exercée sur le satellite s'obtient en utilisant la formule (3.4) avec I donnée par (3.5), où le domaine d'intégration en Ω est le cône défini ci-dessus. On trouve alors

$$p = \frac{1}{c} \int_{\Omega \in C} \int_0^{+\infty} (\Omega \cdot n)^2 B(T_s, \nu) \nu d\nu d\Omega,$$

où n est la normale à la voile, dirigée vers le satellite (et donc portée par l'axe x). On a donc

$\Omega \cdot n = \Omega_x = \cos \phi$. La mesure en Ω vaut $\sin \phi d\phi d\theta$, et l'on trouve

$$\begin{aligned} p &= \frac{1}{c} \int_0^{+\infty} B(T_s, \nu) d\nu \int_{\Omega \in C} (\Omega \cdot n)^2 d\Omega \\ &= \frac{1}{c} \sigma T_S^4 \int_0^\alpha \int_0^{2\pi} \cos^2 \phi \sin \phi d\phi d\theta \\ &= \frac{2}{c} \sigma_{SB} T_S^4 \int_0^\alpha \cos^2 \phi \sin \phi d\phi, \end{aligned}$$

où l'on a utilisé (3.6). On peut calculer l'intégrale en ϕ exactement, mais comme $\sin \phi$ est très petit (voir ci-dessus), il est plus simple et suffisamment précis d'approcher ϕ par $\sin \phi$ et $\cos \phi$ par 1 pour trouver $\int_0^\alpha \cos^2 \phi \sin \phi d\phi \approx \int_0^\alpha \phi d\phi = \alpha^2/2 \approx \frac{1}{2} \sin^2 \alpha = \frac{1}{2} (R/L)^2$. Ainsi, on trouve

$$p \approx \frac{1}{c} \sigma_{SB} T_S^4 \left(\frac{R}{L} \right)^2,$$

soit $p \approx 4.56 \cdot 10^{-6} \text{ N.m}^{-2}$.

La relation liant force, pression, et surface de la voile $|A|$ est $F = p|A|$, soit $|A| = F/p \approx 220 \text{ m}^2$.

4 Équation de transport

Suivons un rayon lumineux le long de sa trajectoire : entre t et dt , la position des photons passe de x à $x + \Delta tc\Omega$, soit une distance $\Delta s = c\Delta t$. La variation de l'intensité spécifique est donc

$$\Delta I = I(t + \Delta t, x + \Delta tc\Omega, \Omega, \nu) - I(t, x, \Omega, \nu).$$

Sans interaction avec la matière, il n'y a pas de variation d'intensité : $\Delta I = 0$.

Les interactions avec la matière font perdre un certain nombre de photons : certains sont absorbés (phénomène d'absorption) et d'autres voient leur direction modifiée (phénomène de dispersion). La perte d'intensité est supposée proportionnelle à l'intensité elle-même et à la distance parcourue. La perte d'intensité s'écrit donc

$$\Delta I = -\kappa I \Delta s,$$

où κ est le coefficient d'atténuation. Il peut dépendre de la fréquence et de la position.

On suppose que la matière, à la température T , ré-émet une certaine quantité de radiations, selon la loi du corps noir, là aussi de façon proportionnelle à la distance parcourue. On rajoute donc le terme correspondant pour trouver

$$\Delta I = -\kappa I \Delta s + \kappa_m B(T, \nu) \Delta s,$$

où κ_m est le coefficient d'atténuation.

Enfin, il faut tenir compte d'un certain nombre de photons qui avaient une direction Ω' et qui prennent la direction Ω après leur interaction avec la matière. Leur énergie (et donc leur

fréquence) n'est pas modifiée dans ce processus : la collision est dite élastique. Cela donne un gain d'intensité, là encore proportionnel à Δs , que l'on rajoute au bilan précédent :

$$\Delta I = -\kappa I \Delta s + \kappa_m B(T, \nu) \Delta s + \sigma \int_{S^2} s(\Omega, \Omega') I(t, x, \Omega', \nu) d\Omega' \Delta s. \quad (3.7)$$

L'intégrale en direction somme toute les contributions de photons de direction quelconque Ω' avant collision, et le noyau $s(\Omega, \Omega')$ indique pour chaque direction Ω' la proportion de photons prenant la direction Ω . Ce noyau satisfait la propriété de symétrie $s(\Omega, \Omega') = s(\Omega', \Omega)$. Il satisfait aussi une autre propriété expliquée comme suit. Fixons Ω' avant collision, on fait sur toute les directions possibles $\Omega \in \mathbb{S}^2$ après collision la somme des proportions de photons passant de Ω' à Ω : cette somme vaut nécessairement 1 (la direction Ω' s'est forcément changée en une des directions Ω). Cela se traduit par la relation de normalisation

$$\int_{S^2} s(\Omega, \Omega') d\Omega = 1. \quad (3.8)$$

On peut alors diviser (3.7) par $\Delta s = c\Delta t$ et passer à la limite $\Delta t \rightarrow 0$ pour trouver au membre de gauche

$$\begin{aligned} & \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{I(t + \Delta t, x + \Delta t c \Omega, \Omega, \nu) - I(t, x, \Omega, \nu)}{c\Delta t} \\ &= \frac{1}{c} \partial_t I(t, x, \Omega, \nu) + \Omega \cdot \nabla_x I(t, x, \Omega, \nu). \end{aligned}$$

On a donc établi l'équation du transfert radiatif

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \partial_t I(t, x, \Omega, \nu) + \Omega \cdot \nabla_x I(t, x, \Omega, \nu) \\ &= -\kappa I + \kappa_m B(T, \nu) + \sigma \int_{S^2} s(\Omega, \Omega') I(t, x, \Omega', \nu) d\Omega'. \end{aligned} \quad (3.9)$$

Il faut tenir compte d'une contrainte importante : si le rayonnement est celui d'un corps noir, alors l'interaction avec la matière ne doit avoir aucune influence sur la variation de I qui reste nulle. En insérant $I = B(t, \nu)$ dans le membre de droite de (3.9), on trouve alors $-\kappa B(T, \nu) + \kappa_m B(T, \nu) + \sigma (\int_{S^2} s(\Omega, \Omega') d\Omega') B(T, \nu) = 0$, et la relation de normalisation (3.8) et la propriété de symétrie de s nous donne alors $\kappa = \kappa_m + \sigma$: le coefficient d'absorption est la somme des coefficients d'émission et de dispersion. On peut alors réécrire l'équation du transfert sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \partial_t I(t, x, \Omega, \nu) + \Omega \cdot \nabla_x I(t, x, \Omega, \nu) \\ &= \underbrace{\kappa_m (B(T, \nu) - I(t, x, \Omega, \nu))}_{\text{absorption-réémission}} + \underbrace{\sigma \left(\int_{S^2} s(\Omega, \Omega') I(t, x, \Omega', \nu) d\Omega' - I(t, x, \Omega, \nu) \right)}_{\text{dispersion}}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

qui différencie bien les deux types d'interaction avec la matière. Noter que la structure du terme absorption-réémission est de type "relaxation", comme pour l'opérateur BGK (1.49) de la dynamique des gaz.

Le coefficient σ , appelé opacité, a la dimension de l'inverse d'une longueur qui peut s'interpréter comme la distance sur laquelle agit le phénomène de dispersion, dû aux collisions avec les particules de matière. On peut assimiler cette distance au libre parcours moyen des photons entre deux collisions avec le milieu, ou à la distance moyenne entre particules. Les coefficients κ_m et σ peuvent dépendre de x (matériau non homogène) et de ν , mais dans certains cas, on peut les considérer constants. On peut aussi supposer que la dispersion se fait de façon uniforme, c.-à.d. que $s = 1/4\pi$, ou qu'il n'y a pas de diffraction du tout ($\sigma = 0$).

Un modèle simplifié couramment utilisé est le modèle unidimensionnel construit de la façon suivante. On suppose que I ne dépend que d'une variable d'espace (notée x) et est invariante en direction autour de l'axe des x , et on suppose $s = 1/4\pi$. Notons ϕ et θ les angles définissant Ω en coordonnées sphériques, ϕ étant l'angle avec l'axe des x : autrement dit $\Omega = (\cos \phi, \sin \phi \cos \theta, \sin \phi \sin \theta)$. L'invariance axiale de I se traduit par le fait que I ne dépend que de ϕ et pas de θ . Il est alors intéressant d'éliminer la dépendance en θ de l'équation (3.10) en l'intégrant par rapport à θ . On note $f = \int_0^{2\pi} I d\theta = 2\pi I$. On trouve alors les termes suivants. Le terme de dérivée en temps donne

$$\int_0^{2\pi} \frac{1}{c} \partial_t I d\theta = \frac{1}{c} \partial_t f.$$

Le terme de dérivée en espace donne

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \Omega \cdot \nabla_x I d\theta &= \int_0^{2\pi} \cos \phi \partial_x I d\theta = \cos \phi \partial_x f \\ &= \mu \partial_x f, \end{aligned}$$

où $\mu = \cos \phi$. Dans le terme de diffraction, B ne dépend pas de Ω , donc de θ non plus et l'on trouve

$$\int_0^{2\pi} \kappa(B(T, \nu) - I) d\theta = \kappa_m(2\pi B(T, \nu) - I).$$

Enfin, sachant que $d\Omega = \sin \phi d\phi d\theta$ et $\sin \phi d\phi = d\mu$, l'intégrale du terme de diffraction donne

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \frac{1}{4\pi} \int_{S^2} I(\Omega') d\Omega' d\theta &= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi I(\phi') \sin \phi' d\phi' d\theta' d\theta \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\pi f(\phi') \sin \phi' d\phi' \\ &= \frac{1}{2} \int_0^1 f(\mu') d\mu'. \end{aligned}$$

Finalement, le modèle unidimensionnel s'écrit donc

$$\begin{aligned} &\frac{1}{c} \partial_t f(t, x, \mu, \nu) + \mu \partial_x f(t, x, \mu, \nu) \\ &= \kappa_m(2\pi B(T, \nu) - f(t, x, \mu, \nu)) + \sigma \left(\frac{1}{2} \int_0^1 f(t, x, \mu', \nu) d\mu' - f(t, x, \mu, \nu) \right). \end{aligned} \quad (3.11)$$

5 Couplage avec l'évolution de la température du matériau

Dans le cas d'un matériau solide, donc sans convection, l'équation d'évolution de l'énergie est

$$\partial_t e + \nabla \cdot q = 0,$$

où q est le vecteur flux de chaleur. Si l'énergie est donnée par $\rho c_m T$ (où ρ est la densité du matériau et c_m sa capacité calorifique), et si le flux de chaleur est uniquement dû à la conduction, alors la loi de Fourier donne $q = -\kappa_c \nabla T$. Pour tenir compte du flux de chaleur radiatif, il suffit d'ajouter à q le flux de chaleur q_{rad} calculé précédemment (voir (3.3)). On trouve donc l'équation de la chaleur

$$\begin{aligned} \rho c_m \partial_t T &= \nabla \cdot \kappa_c \nabla T - \nabla \cdot q_{rad} \\ &= \nabla \cdot \kappa_c \nabla T - \nabla \cdot \int \Omega I(t, x, \Omega, \nu) d\Omega d\nu. \end{aligned}$$

Un cas fréquemment rencontré est celui où les échelles de temps du matériau sont bien plus grandes que celles du transfert radiatif. Ainsi, pendant un temps relativement bref à l'échelle de la thermique du matériau, le rayonnement, dont l'échelle de temps est bien plus petite, atteint immédiatement un état stationnaire. L'équation du transfert (3.10) peut donc être considéré comme stationnaire et l'on peut obtenir une expression intéressante de $\nabla \cdot q_{rad}$. L'équation stationnaire est

$$\begin{aligned} \Omega \cdot \nabla_x I(t, x, \Omega, \nu) \\ = \kappa_m (B(T, \nu) - I(t, x, \Omega, \nu)) + \sigma \left(\int_{S^2} s(\Omega, \Omega') I(t, x, \Omega', \nu) d\Omega' - I(t, x, \Omega, \nu) \right). \end{aligned} \quad (3.12)$$

En intégrant cette équation par rapport à Ω et ν , on remarque que la deuxième intégrale du membre de droite s'annule (cela est dû à la condition de normalisation (3.8) de s). Le premier terme du membre de gauche n'est autre que la divergence de q_{rad} , et l'on trouve

$$\nabla \cdot \int \Omega I(t, x, \Omega, \nu) d\Omega d\nu = \int \kappa_m (B(T, \nu) - I(t, x, \Omega, \nu)) d\Omega d\nu.$$

Dans le cas où κ_m ne dépend pas de ν , la relation de Stefan-Boltzmann (3.6) donne

$$\nabla \cdot \int \Omega I(t, x, \Omega, \nu) d\Omega d\nu = \sigma T^4 - \kappa_m \int I(t, x, \Omega, \nu) d\Omega d\nu,$$

et l'équation de la chaleur est finalement :

$$\rho c_m \partial_t T = \nabla \cdot \kappa_c \nabla T - \left(\sigma T^4 - \kappa_m \int I(t, x, \Omega, \nu) d\Omega d\nu \right),$$

qui doit être couplée à l'équation du transfert (3.12).

6 Transfert radiatif dans un matériau opaque : limite de diffusion

Considérons le phénomène de dispersion dans lequel les photons voient leur direction modifiée après une collision avec les particules du milieu traversé. Pour simplifier, le phénomène d'absorption/émission sera négligé. Plus la distance entre particules est faible, et plus les photons sont susceptibles d'entrer fréquemment en collision avec elles : on dit que le milieu est "opaque" (ou optiquement "épais"). Nous allons montrer ici que l'énergie radiative se propage alors selon une loi de diffusion, de la même façon que pour la conduction de la chaleur.

Ce résultat s'obtient par une analyse asymptotique assez proche du développement de Chapman-Enskog vu pour la dynamique des gaz (voir section 10.3). Pour simplifier, nous considérons l'équation (3.11) du transfert radiatif unidimensionnel, sans terme d'absorption-réémission :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \partial_t f(t, x, \mu, \nu) + \mu \partial_x f(t, x, \mu, \nu) \\ &= \sigma \left(\frac{1}{2} \int_0^1 f(t, x, \mu', \nu) d\mu' - f(t, x, \mu, \nu) \right), \end{aligned} \quad (3.13)$$

et l'on considère que la fréquence ν n'est ici qu'un paramètre fixé. La première étape de l'analyse consiste à adimensionner l'équation de façon à préciser le fait que le milieu est opaque. Considérons une distance macroscopique de référence $x^* = L$ (par exemple l'épais-

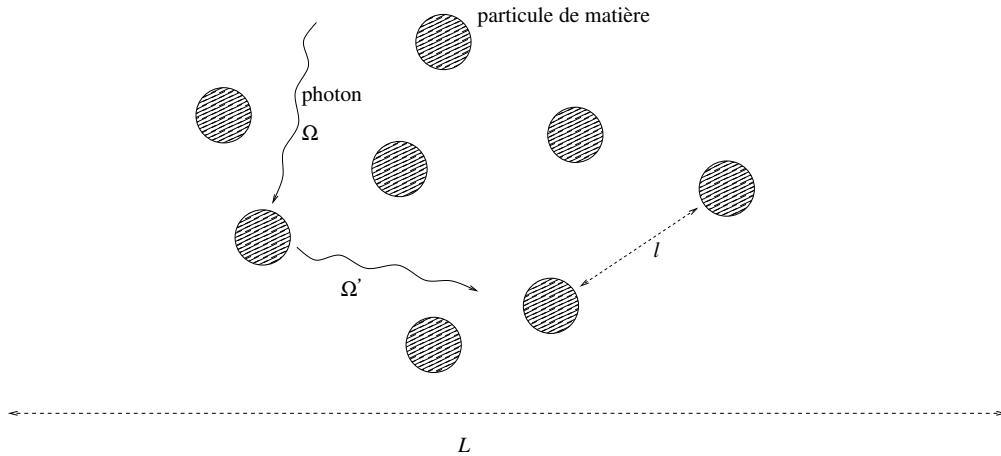


FIGURE 3.3 – Collisions des photons avec la matière

seur d'un verre en cours de cuisson, ou l'épaisseur d'une couche de nuages). Considérons un temps macroscopique de référence t^* (qui sera précisé par la suite). Le coefficient d'opacité σ est l'inverse d'une longueur, que l'on a interprété section 4 comme le libre parcours moyen des photons entre deux collisions. En choisissant une valeur typique l de ce libre parcours moyen, on a donc une valeur caractéristique $\sigma^* = 1/l$ de σ . Supposons enfin fixée une valeur caractéristique f^* de la distribution f (sa valeur précise n'a pas d'importance pour la suite).

On définit alors les grandeurs adimensionnées $x' = x/x^*$, $t' = t/t^*$, $\sigma' = \sigma/\sigma^*$, et $f'(t', x', \mu) = f(t, x, \mu)/f^*$, et l'on effectue le changement de variables et d'inconnues dans l'équation (3.13) pour trouver

$$\begin{aligned} & \frac{1}{c} \frac{f^*}{t^*} \partial_t f'(t', x', \mu) + \mu \frac{f^*}{x^*} \partial_x f'(t', x', \mu) \\ &= f^* \sigma^* \sigma' \left(\frac{1}{2} \int_0^1 f'(t', x', \mu') d\mu' - f'(t', x', \mu) \right). \end{aligned}$$

On peut alors éliminer f^* et multiplier l'équation par x^* pour trouver

$$\begin{aligned} & \frac{x^*}{ct^*} \partial_t f'(t', x', \mu) + \mu \partial_x f'(t', x', \mu) \\ &= x^* \sigma^* \sigma' \left(\frac{1}{2} \int_0^1 f'(t', x', \mu') d\mu' - f'(t', x', \mu) \right). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Le produit $x^* \sigma^*$ vaut L/l , c'est donc l'inverse du rapport du libre parcours moyen à la longueur macroscopique caractéristique du problème. L'hypothèse de milieu opaque se traduit naturellement par le fait que ce rapport, noté ε , est très petit : c'est le paramètre qui va nous permettre de mener l'analyse asymptotique. Rappelons donc sa définition :

$$\varepsilon = \frac{1}{x^* \sigma^*} = \frac{l}{L}. \quad (3.15)$$

Pour le moment, nous n'avons pas encore précisé l'échelle de temps t^* . Une échelle naturelle serait $t^* = L/c$, soit le temps mis par un photon pour traverser le domaine. Cependant, on peut montrer que cette échelle est trop petite pour observer le phénomène de diffusion (en fait on trouve qu'à cette échelle, l'énergie de radiation n'évolue pas ! voir l'exercice 3.4). L'échelle convenable est en fait $t^* = \frac{L}{\varepsilon c}$, qui est donc beaucoup plus grande que la précédente. On trouve alors l'équation adimensionnée, dans laquelle, pour simplifier, on préfère ne plus noter les ' :

$$\begin{aligned} & \varepsilon \partial_t f(t, x, \mu) + \mu \partial_x f(t, x, \mu) \\ &= \frac{\sigma}{\varepsilon} \left(\frac{1}{2} \int_0^1 f(t, x, \mu') d\mu' - f(t, x, \mu) \right). \end{aligned} \quad (3.16)$$

La deuxième étape consiste à écrire une équation d'évolution de l'intensité moyenne $\frac{1}{2} \int_0^1 f(t, x, \mu) d\mu$. Pour cela, on intègre (3.16) par rapport à μ et l'on trouve :

$$\varepsilon \partial_t \frac{1}{2} \int_0^1 f(t, x, \mu) d\mu + \partial_x \frac{1}{2} \int_0^1 \mu f(t, x, \mu) d\mu = 0.$$

Pour simplifier la suite, on notera désormais $\langle \phi \rangle = \frac{1}{2} \int_0^1 \phi(\mu) d\mu$ pour toute fonction ϕ de μ . Ainsi, l'équation précédente s'écrit de façon plus compacte

$$\varepsilon \partial_t \langle f \rangle + \partial_x \langle \mu f \rangle = 0. \quad (3.17)$$

La troisième étape consiste à utiliser l'équation sur f (3.16) pour construire une approximation du flux $\langle \mu f \rangle$ apparaissant dans l'équation précédente. En multipliant (3.16) par ε/σ et en réarrangeant les termes, on trouve

$$f = \langle f \rangle - \frac{\varepsilon}{\sigma} \mu \partial_x f - \frac{\varepsilon^2}{\sigma} \partial_t f. \quad (3.18)$$

Ce développement peut aussi s'écrire comme un développement à l'ordre 1 :

$$f = \langle f \rangle + O(\varepsilon). \quad (3.19)$$

On peut alors utiliser (3.19) dans le membre de droite de (3.18) pour trouver

$$f = \langle f \rangle - \frac{\varepsilon}{\sigma} \mu \partial_x \langle f \rangle + O(\varepsilon^2). \quad (3.20)$$

Cette dernière relation nous permet alors d'approcher le flux de la façon suivante :

$$\begin{aligned} \langle \mu f \rangle &= \langle \mu (\langle f \rangle - \frac{\varepsilon}{\sigma} \mu \partial_x \langle f \rangle) \rangle + O(\varepsilon^2) \\ &= \langle \mu \rangle \langle f \rangle - \frac{\varepsilon}{\sigma} \langle \mu^2 \rangle \partial_x \langle f \rangle + O(\varepsilon^2) \\ &= -\frac{\varepsilon}{3\sigma} \partial_x \langle f \rangle + O(\varepsilon^2), \end{aligned} \quad (3.21)$$

où l'on a utilisé les relations $\langle \mu \rangle = 0$ et $\langle \mu^2 \rangle = 1/3$.

Cette expression nous permet alors d'écrire une équation d'évolution approchée pour $\langle f \rangle$: en injectant (3.21) dans (3.17) et en divisant par ε , on trouve

$$\partial_t \langle f \rangle - \partial_x \frac{1}{3\sigma} \partial_x \langle f \rangle = O(\varepsilon), \quad (3.22)$$

qui est une équation de diffusion à ε près.

Une des conséquences de cette analyse est le résultat de convergence suivant : quand ε tend vers 0 (c.-à-d. que le milieu est de plus en plus opaque, ou encore que les photons subissent de plus en plus de collisions), alors :

- (3.18) implique que f tend vers sa moyenne par rapport à μ , c.-à-d. vers une distribution isotrope en direction ;
- (3.22) implique que cette distribution isotrope est solution d'une équation de diffusion, dont le coefficient de diffusion est $1/(3\sigma)$.

Ce résultat fondamental permet de calculer de façon rapide la solution d'un bon nombre de problèmes de transfert radiatif. C'est le parfait analogue des résultats obtenus en dynamique des gaz où l'on a vu que les solutions des équations d'Euler ou de Navier-Stokes sont des approximations de la solution de l'équation de Boltzmann.

7 Exercices

Exercice 3.3. Par la méthode donnée section 6, calculer l'équation satisfaite par $\langle f \rangle$ quand ε tend vers 0 dans le cas où l'on ne néglige plus le terme d'absorption/émission de (3.11). Il faut supposer qu'une valeur caractéristique du coefficient κ_m est d'ordre $1/\varepsilon$ par rapport à x^* pour obtenir une équation différente de celle obtenue précédemment.

Exercice 3.4. Par la méthode donnée section 6, calculer l'équation satisfaite par $\langle f \rangle$ quand ε tend vers 0 si l'échelle de temps est $t^* = L/c$, et en conclure que $\langle f \rangle$ est constante à cette échelle.

Exercice 3.5. Par la méthode donnée section 6, calculer l'équation satisfaite par $\langle f \rangle$ quand ε tend vers 0 pour le cas multidimensionnel (voir (3.10)).

Modélisation des sprays

Sommaire

1	Introduction	111
2	Description des particules	112
3	Modèle cinétique	114
4	Effet des particules sur le fluide	116
5	Modèles macroscopiques	117
6	Un exemple d'application : modélisation des embruns océaniques	119
7	TP : simulation d'un spray	119

1 Introduction

Les sprays sont des écoulements constitués d'au moins deux phases : une phase fluide porteuse, et une phase constituées de particules, solides ou liquides. Pour que ce mélange soit qualifié de spray, il faut que les particules soient suffisamment dispersées. Cela peut être quantifié par la fraction volumique des particules (c'est-à-dire la proportion du volume occupé par toutes les particules par rapport au volume total considéré) qui est entre 10^{-2} et 10^{-5} . On rencontre ce type d'écoulements dans de nombreuses situations, industrielles ou environnementales. Donnons trois exemples :

- le carburant injecté dans la chambre de combustion d'un moteur : le jet de carburant se sépare en une multitude de gouttelettes qui sont transportées dans l'air de la chambre. La phase porteuse est l'air, et la phase dispersée est le carburant. Les particules considérées ici sont donc des particules liquides : les gouttelettes de carburant.
- embruns océaniques : lors du déferlement d'un vague, un grand nombre de petites gouttelettes d'eau de mer sont arrachées à la surface et transportées par le vent. Là aussi, la phase porteuse est l'air, et les particules sont les gouttelettes d'eau.
- spray médical : un spray buccal comme de la ventoline est constitué d'un gaz porteur et d'une multitude de particules solides censées favoriser la désinflammation des bronches.

L'hypothèse générale est que ces particules sont suffisamment petites devant l'échelle macroscopique du problème pour être considérées comme ponctuelles (c'est la même idée qu'en théorie cinétique des gaz). Leur structure interne n'est donc pas décrite précisément (on n'utilise pas les équations de Navier-Stokes pour décrire l'intérieur des gouttes par exemple). Néanmoins, les particules portent une information relative à leur état global : leur position, vitesse, masse, température par exemple. Le modèle de base utilisé pour décrire le spray est donc constitué d'un modèle pour le fluide porteur (en général équations de Navier-Stokes incompressibles avec transfert thermique), et d'un modèle lagrangien décrivant les trajectoires des particules et l'évolution de leur état. L'influence du fluide porteur sur le transport des particules est prise en compte par des forces d'entraînement, et on peut aussi tenir compte de transformations des particules comme :

- la coalescence : fusion de deux particules après une collision ;
- la fragmentation : sous l'effet de la friction exercée par le fluide porteur, une instabilité de la surface de la particule fluide peut apparaître, qui génère une séparation de la goutte en plusieurs gouttes secondaires ;
- l'évaporation : le diamètre de la gouttelette diminue suite à une perte de masse ;
- le transfert de chaleur : la goutte acquiert ou cède de la chaleur au fluide porteur.

La modélisation des sprays est un domaine assez complexe qui fait l'objet de nombreux travaux de recherche à l'heure actuelle, motivés par des problèmes industriels très concrets, en particulier en aéronautique. Nous renvoyons le lecteur intéressé au livre de Marchisio et Fox [13], ou au bref article de Murrone et Villedieu [17].

Dans la suite de ce chapitre, nous nous attacherons à décrire brièvement les différents modèles pour les mélanges gaz/gouttelettes en mettant en avant les points communs avec les deux domaines abordés auparavant (gaz raréfiés et transfert radiatif), ainsi que leur spécificités. Nous concluons avec un exemple simple d'application.

2 Description des particules

Les particules sont en général considérées comme des sphères repérés par leur position $x \in \mathbb{R}^3$, vitesse $v \in \mathbb{R}^3$, rayon $r > 0$, et température $T > 0$. Le volume d'une particule est donc $V(r) = \frac{4}{3}\pi r^3$, et si sa masse volumique est ρ_p , alors sa masse est $m_p(r) = \rho_p V(r)$. Pour décrire l'évolution des paramètres x, v, r, T , les particules sont assimilées à des points, ce qui est légitime si l'échelle d'observation est bien plus grande que r . Dans les sections suivantes, nous décrivons maintenant la façon dont varient ces paramètres.

2.1 Position et vitesse

La position et la vitesse évoluent selon la loi de la dynamique de Newton :

$$x'(t) = v(t) \quad \text{et} \quad m_p(r(t))v'(t) = F(t, x(t), v(t)). \quad (4.1)$$

La force F agissant sur la particule est la somme de plusieurs contributions. Nous décrivons ici les principales que sont la force de gravité et la force de traînée, mais il peut y en avoir d'autres qui doivent être prises en compte dans certains cas.

Gravité. Cette force est

$$F_g = m_p(r)g,$$

où g est le vecteur de l'accélération gravitationnelle.

Force de traînée. La force de traînée due au fluide environnant est

$$F_S = \frac{m_p(r)}{\tau_p}(u - v),$$

où u est la vitesse du fluide porteur et τ_p un temps de relaxation propre à la particule. Cette force induit une relaxation de la vitesse de la particule vers la vitesse du fluide.

Dans le cas d'un fluide porteur modélisé par les équations de Stokes, et si le *nombre de Reynolds* de la particule $Re_p = \frac{2r|v-u|}{\nu}$ est petit, alors le temps de relaxation est constant et vaut

$$\tau_p = \frac{2r^2}{9\mu}\rho_p,$$

et la force correspondante est appelée force de Stokes. Le coefficient μ est la viscosité du fluide porteur.

Le nombre de Stokes $S_t = \tau_p/\tau_f$, où τ_f est une échelle de temps caractéristique du fluide, permet d'identifier les régimes pour lesquels les particules sont plus ou moins sensibles à la vitesse du fluide. En effet, en prenant τ_f comme échelle de temps d'observation, l'équation de Newton (4.1) adimensionnée s'écrit, dans le cas où seule la force de traînée est prise en compte, $v'_p(t) = \frac{1}{S_t}(u - v)$: donc v_p tend vers u d'autant plus vite que le nombre de Stokes est petit.

Si les effets inertiels ne peuvent être négligés, le temps de relaxation est

$$\tau_p = \frac{\rho_p \frac{8}{3}r}{\rho C_D \|u - v\|},$$

où ρ la masse volumique du fluide porteur, et C_D est le coefficient de traînée de la particule, de sorte que la force de traînée devient $F_S = \frac{1}{2}\rho C_D \pi r^2 \|u - v\|(u - v)$.

Souvent, le fluide porteur est turbulent. Cela est recherché en combustion, pour favoriser le mélange air/carburant. Cela s'observe aussi en océanographie, où il existe une couche limite turbulente au dessus de la surface de l'océan. La turbulence du fluide induit des fluctuations aléatoires de la position et vitesse des particules. Si le champ de vitesse du fluide porteur u n'est pas décrit à une échelle suffisamment fine (comme avec les modèles RANS), on doit tenir compte de ces fluctuations en modifiant les équations du mouvement des particules : on rajoute au système différentiel (4.1) un terme de bruit, et l'on obtient des équations différentielles stochastiques appelées équations de Langevin.

Exercice 4.1. En supposant le fluide porteur stationnaire et uniforme, et que le temps de relaxation de Stokes τ_p est constant, montrer que la *vitesse terminale* d'une particule soumise à la gravité vaut $v_t = \tau_p g + u$.

2.2 Rayon et température

Les variations du rayon et de la température des particules fluides peuvent se modéliser par les équations différentielles

$$r'(t) = K(t, x, v, r, T) \quad \text{et} \quad T'(t) = H(t, x, v, r, T), \quad (4.2)$$

où K et R dépendent de l'état du fluide porteur. Ces taux de variations sont donnés par des formules assez complexes qui dépendent fortement du problème considéré. Nous renvoyons à [17] pour des formules utilisées en aéronautique et à [20] pour des taux utilisés pour les embruns marins. Les variations de taille due à la coalescence et à la fragmentation sont dus à des processus de collisions et ne peuvent pas se modéliser ainsi.

En théorie, il est possible de décrire l'évolution du spray en résolvant le modèle qui décrit le fluide (en général Navier-Stokes incompressible) et les équations lagrangiennes (4.1) et (4.2) qui décrivent les particules. En pratique, cela est assez difficile, car le nombre de particules est extrêmement grand. Il est alors intéressant de recourir à une modélisation cinétique, ce qui est décrit dans la section suivante.

3 Modèle cinétique

3.1 Densité de particules

Notons $f(t, x, v, r, T)$ la densité numérique de particules dans l'espace position-vitesse-rayon-température (aussi appelé *espace des phases*). Autrement dit, le nombre de particules qui, à l'instant t , sont situées dans un volume élémentaire dx autour de la position $x \in \mathbb{R}^3$, et dont la vitesse, rayon, et température fluctuent dans dv , dr , et dT autour de $v \in \mathbb{R}^3$, $r > 0$, et $T > 0$, respectivement, est

$$dN = f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT.$$

Connaissant cette densité, ou distribution, on peut ainsi avoir accès à des quantités macroscopiques comme par exemple :

— le nombre de particules dans un domaine $\Omega_x \in \mathbb{R}^3$:

$$N = \int_{\Omega_x} \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT;$$

— le volume occupé par la phase dispersée : le volume occupé par les dN particules est $dN \times V_p(r) = dN \times \frac{4}{3}\pi r^3$, d'où le volume total

$$\mathcal{V} = \int_{\Omega_x} \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \frac{4}{3}\pi r^3 f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT.$$

On peut aussi accéder à des densités réduites comme la densité de particules par unité de volume dans l'espace des positions-rayons, soit

$$n(t, x, r) = \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_0^{+\infty} f(t, x, v, r, T) dv dT,$$

de sorte que le nombre de particules dans dx autour de x et de rayon dans dr autour de r vaut $n(t, x, r) dx dr$. Bien d'autres quantités de ce type peuvent ainsi être définies.

3.2 Équation cinétique

Cette équation est plus complexe à obtenir que pour la dynamique des gaz ou le transfert radiatif. Dans ces deux cas, l'équation était une simple conséquence du fait que la variation de f le long d'une trajectoire n'est due qu'aux collisions : en l'absence de collision, f ne varie pas, et on obtient facilement le terme de transport en calculant cette variation. Ici, la densité f varie le long d'une trajectoire, même sans collision, en raison de l'interaction avec le fluide : la vitesse, le rayon, et la température ne sont pas constants. Pour en tenir compte, il faut raisonner sur le nombre de particules plutôt que sur la densité, avec un argument parfois utilisé pour établir les lois de conservations.

On raisonne alors de la façon suivante : à l'instant initial $t = 0$, considérons un volume $\Omega_0 = \Omega_{0,x} \times \Omega_{0,v} \times \Omega_{0,r} \times \Omega_{0,T}$ dans l'espace des phases, et calculons le nombre N_0 de particules dans ce volume. Par définition de f , il vient

$$N_0 = \int_{\Omega_0} f(t, x_0, v_0, r_0, T_0) dx_0 dv_0 dr_0 dT_0,$$

où l'on a volontairement indicé par 0 les variables utilisées. On note ensuite $\Omega(t)$ le volume qui à l'instant t contient toutes les particules qui étaient dans Ω_0 à l'instant initial, et uniquement celles-ci. Naturellement, le nombre de particules dans $\Omega(t)$ est

$$N(t) = \int_{\Omega(t)} f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT, \quad (4.3)$$

et par définition, ce nombre n'a pas changé au cours du temps et l'on a $N(t) = N_0$. Ceci étant vrai pour tout temps, on peut affirmer que $N'(t) = 0$.

Pour traduire cette propriété sur f , il faut alors calculer la dérivée par rapport au temps de $N(t)$ en utilisant (4.3), ce qui pose quelques difficultés, puisque la variable t apparaît à la fois dans l'intégrande f , mais aussi dans le domaine d'intégration $\Omega(t)$. Il existe une formule pour faire cela, appelée parfois théorème du transport de Reynolds, qui donne

$$\begin{aligned} N'(t) &= \frac{d}{dt} \int_{\Omega(t)} f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT, \\ &= \int_{\Omega(t)} \left(\partial_t f + \nabla_x \cdot (vf) + \nabla_v \cdot \left(\frac{1}{m_p} Ff \right) + \partial_r(Kf) + \partial_T(Hf) \right) dx dv dr dT, \end{aligned}$$

où F , K , et H sont la force et les taux de variation intervenants dans les lois d'évolution (4.1) et (4.2). Cette relation étant valable quel que soit le domaine d'intégration, on en déduit que l'intégrande est nulle, ce qui donne l'équation

$$\partial_t f + \nabla_x \cdot (vf) + \nabla_v \cdot \left(\frac{1}{m_p} Ff \right) + \partial_r(Kf) + \partial_T(Hf) = 0. \quad (4.4)$$

Dans le domaine des sprays, cette équation est appelée équation de Williams, ou de Williams-Boltzmann. Nous renvoyons à l'annexe 5 page 137 pour une démonstration de la formule de Reynolds.

Les phénomènes de coalescence et de fragmentation peuvent être assimilés à des processus de collision : en suivant l'approche de Boltzmann pour la théorie cinétique des gaz, on peut

construire des opérateurs qui modélisent ces phénomènes. Ils apparaissent ainsi au second membre de l'équation de Williams (4.4) pour donner

$$\partial_t f + \nabla_x \cdot (vf) + \nabla_v \cdot \left(\frac{1}{m_p} Ff \right) + \partial_r(Kf) + \partial_T(Hf) = Q_{frag}(f) + Q_{coal}(f). \quad (4.5)$$

Pour des particules fluides (gouttelettes), la fragmentation dépend du *nombre de Weber* des gouttelettes, un nombre sans dimension défini par

$$W_{e,p} = \frac{\rho|u-v|^2 d}{\sigma_p}, \quad (4.6)$$

où ρ est la masse volumique du gaz, $u-v$ la vitesse relative caractéristique des gouttelettes, d le diamètre d'une gouttelette, et σ_d sa tension superficielle. Il mesure le rapport entre les forces d'inertie et la force due à la tension superficielle. Quand ce nombre dépasse une valeur critique (évaluée à 12), des instabilités de type Kelvin-Helmoltz se développent à la surface de la gouttelette, et celle-ci se fragmente en plusieurs gouttelettes secondaires. À titre d'illustration, nous donnons ci-dessous une expression de l'opérateur de fragmentation (tirée de [19]) :

$$Q_{frag}(f)(r, v) = \int_0^s \int_{\mathbb{R}_v^3} \nu_{frag}(s', v') f(v', r') h(s, v, s', v') ds' dv' - \nu_{frag}(s, v) f(v, r),$$

où ν_{frag} est la fréquence de fragmentation et h rend compte de la distribution des particules secondaires et est donnée de façon empirique. En outre, s désigne ici la surface de la goutte, soit $s = 4\pi r^2$.

La coalescence est un phénomène lui aussi très complexe. Sa fréquence dépend de la densité du spray : plus il y a de particules, plus celles-ci auront de chances d'entrer en collision. On peut définir un nombre de Knudsen pour quantifier cette notion, et l'on pose souvent $Kn_p = \tau_c/\tau_p$, où τ_c est le temps caractéristique entre deux collisions, et τ_p est le temps de relaxation de Stokes (celui nécessaire à la vitesse de la particule pour tendre vers la vitesse du fluide porteur). En outre, toute collision ne donnera pas lieu à de la coalescence : cela dépend de l'angle d'impact et du nombre de Weber, et on pourra observer un rebond, une coalescence définitive ou temporaire, une fragmentation, etc. Nous renvoyons donc à [19] pour des expressions de l'opérateur correspondant.

4 Effet des particules sur le fluide

Admettons que le fluide porteur soit bien décrit par les équations de Navier-Stokes compressibles

$$\begin{aligned} \nabla \cdot u &= 0, \\ \rho(\partial_t u + (u \cdot \nabla)u) + \nabla p &= \mu \Delta u + \mathcal{F}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

où \mathcal{F} représente une densité de forces extérieures agissant sur le fluide. Si le fluide est seulement soumis à la gravité, on a $\mathcal{F} = \rho g$.

Dans le cas d'un spray, nous avons vu que le fluide porteur exerce une force (la force de traînée) sur les particules. En retour, les particules exercent donc une force opposée sur le fluide que nous pouvons calculer comme suit.

Considérons un petit volume de fluide dx de vitesse u centré sur x . Il exerce sur une particule de vitesse v , de rayon r , et de température T , la force $F_S = \frac{m_p}{\tau_p}(u - v)$. La particule exerce donc en retour la force $-F_S$. Dans le volume dx , il y a $dN = f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT$ particules dont la vitesse, le rayon, et la température fluctuent autour de v , r , et T . La force exercée par toutes ces particules étant la somme des forces exercées par chaque particule, on trouve une force cumulée égale à $-F_S \times dN = \frac{m_p}{\tau_p}(v - u)f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT$. La force exercée par toutes les particules, quels que soient leurs vitesses, rayons, et température, est donc

$$F_{particules \rightarrow dx} = \left(\int_{\mathbb{R}_v^3} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \frac{m_p}{\tau_p}(v - u)f(t, x, v, r, T) dv dr dT \right) dx.$$

La densité de force associée s'obtient en divisant par dx pour trouver

$$\mathcal{F} = \int_{\mathbb{R}_v^3} \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \frac{m_p}{\tau_p}(v - u)f(t, x, v, r, T) dv dr dT,$$

qui doit être ajoutée à la densité de force de gravité ρg .

Exercice 4.2. Par un adimensionnement adapté, déterminer sous quelles conditions la force exercée par les particules sur le fluide peut être négligée dans les équations de Navier-Stokes (4.7).

5 Modèles macroscopiques

Dans la majorité des codes de calculs industriels, l'équation (4.5) est résolue par méthode Monte-Carlo, une méthode basée sur un transport lagrangien des particules et une modélisation stochastique des collisions. Les particules simulées sont censées être représentatives d'un grand nombre de particules réelles. Cette méthode est ainsi utilisée dans de grands codes industriels comme le code KIVA [1] ou le code CEDRE de l'ONERA [17]. Une telle méthode est aussi majoritairement utilisée pour les gaz raréfiés, où elle prend le nom de Direct Simulation Monte Carlo (DSMC [2]), et aussi en transfert radiatif. Cela est cependant très coûteux quand les particules sont nombreuses, et la précision des résultats est dégradée dans les zones de faible densité de particules.

Une approche naturelle consisterait à discrétiser directement l'équation (4.5) dans l'espace position-vitesse-rayon-température. Cela est malheureusement impossible à l'heure actuelle (et le restera sans doute longtemps) : la place mémoire et le temps calcul nécessaires à la discrétisation d'un espace à 8 dimensions sont largement supérieurs à ce qu'il est possible d'atteindre avec les ordinateurs actuellement les plus puissants.

Une autre idée est alors de recourir à des modèles macroscopiques, comme on peut le faire en dynamique des gaz (modèles d'Euler ou Navier-Stokes) ou en transfert radiatif (modèle de diffusion). Pour cela, la première étape est toujours la même : écrire des équations de bilan sur des quantités macroscopiques. Dans un premier temps, il est raisonnable de considérer des moments en vitesse et température seulement : on ne prend pas de moment en rayon, car

en général coexistent en un même point de l'espace des particules de rayon très différents, et il est important de garder cette information dans le modèle. Considérons par exemple les moments suivants, qui sont des densités par position et par rayon : la densité de masse

$$\bar{\rho}(t, x, r) = m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} f(t, x, v, r, T) dv dT,$$

et la densité de quantité de mouvement

$$\bar{\rho}\bar{u}(t, x, r) = m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} v f(t, x, v, r, T) dv dT.$$

La barre au dessus des ces quantités est là pour les distinguer des variables associées au fluide porteur. En intégrant (4.5) contre $m_p(r)$, on trouve l'équation suivante

$$\begin{aligned} & \partial_t m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} f(t, x, v, r, T) dv dT + m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} v \cdot \nabla_x f(t, x, v, r, T) dv dT \\ & + m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} \nabla_v \cdot \left(\frac{1}{m_p} F f \right) dv dT + m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} \partial_r (K f) dv dT \\ & + m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} \partial_T (H f) dv dT \\ & = m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} Q_{frag}(f) dv dT + m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} Q_{coal}(f) dv dT. \end{aligned}$$

En intervertissant intégrales et dérivées, on trouve que les deux premiers termes font apparaître $\bar{\rho}$ et $\bar{\rho}\bar{u}$. Le troisième terme est nul, car on intègre une divergence sur \mathbb{R}^3 . De même pour le cinquième terme : en considérant que f est nulle pour $T = 0$ ou $T = +\infty$ (il n'y a pas de particules de température nulle ou infinie), on trouve aussi 0. Le quatrième terme et les seconds membres ne peuvent a priori pas s'écrire aussi simplement. On obtient alors l'équation

$$\partial_t \bar{\rho} + \nabla_x \cdot \bar{\rho}\bar{u} + m_p(r) \partial_r \left(\int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} K f dv dT \right) = Q_{frag,1}(f) + Q_{coal,1}(f).$$

En intégrant (4.5) contre $m_p(r)v$ et en utilisant les mêmes arguments, on trouve l'équation suivante

$$\begin{aligned} & \partial_t \bar{\rho}\bar{u} + \nabla_x \cdot \left(\bar{\rho}\bar{u} + m_p(r) \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} (v - \bar{u}) \otimes (v - \bar{u}) f(t, x, v, r, T) dv dT \right) \\ & - 3 \int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} F f dv dT + m_p(r) \partial_r \left(\int_{\mathbb{R}^3} \int_0^{+\infty} v K f dv dT \right) \\ & = Q_{frag,2}(f) + Q_{coal,2}(f). \end{aligned}$$

Ces équations contiennent des flux (ou moments d'ordre supérieur) qui ne peuvent a priori pas s'exprimer en fonction des inconnues $\bar{\rho}$ et \bar{u} . De même, il peut être difficile d'exprimer les opérateurs de collisions intégrés en fonction de ρ et \bar{u} . En dynamique des gaz ou en transfert

radiatif, ce problème existe aussi, mais il est résolu par une approche asymptotique (voir la section 10 page 43) : quand le nombre de Knudsen est petit, on sait que la distribution des molécules est proche d'une maxwellienne, et on peut donc approcher les flux par les flux maxwelliens. Dans le cas des sprays, cela n'est pas possible : ni la dynamique des collisions entre gouttelettes ni l'interaction avec le fluide n'induisent en général de convergence vers un certain état d'équilibre.

Ce problème, appelé "problème de fermeture", est un obstacle considérable à la mise au point de modèles macroscopiques pour les sprays. Il existe ainsi plusieurs classes de méthodes qui font toujours l'objet de recherches à l'heure actuelle. L'une d'elle, appelée "méthode de moments par quadratures", semble très prometteuse (voir [13]).

6 Un exemple d'application : modélisation des embruns océaniques

Le lecteur est invité à lire l'article [21], dans lequel un modèle cinétique du transport des embruns océaniques est proposé. Le modèle tient compte des échanges de masse, de quantité de mouvement, et de chaleur, entre les embruns et l'atmosphère.

7 TP : simulation d'un spray

Le but de ce TP est de simuler le transport d'un spray par un écoulement de Poiseuille dans un canal.

7.1 Écoulement de Poiseuille

On considère un écoulement 2D dans un canal droit infini dans la direction x , dont les bords haut et bas sont repérés par l'ordonnée $y = c$ et $y = d$. Le domaine de calcul est restreint par les abscisses $x = a$ et $x = b$.

Le champ de vitesse est celui d'un écoulement de Poiseuille de vitesse maximale u_m .

Les particules sont supposées se trouver initialement dans une bande verticale, comprise entre les abscisses $x = a_p$ et $x = b_p$, sur toute la hauteur du canal. Leur position initiale en x et en y est tirée aléatoirement selon la loi uniforme. Leur vitesse initiale est nulle. Toutes les particules ont le même rayon.

Le but de cette partie est de simuler le mouvement de ces particules, entraînées par le fluide, selon la loi de Stokes :

$$v'(t) = \frac{1}{\text{St}}(u(x(t)) - v(t)),$$

écrite ici en variables adimensionnées, où St est le nombre de Stokes d'une particule.

7.1.1 Mouvement des particules

Voici quelques indications pour faire cette simulation :

1. attention : tout au long de l'écriture de votre programme, on conseille de compiler sans optimisation, avec l'option `-fcheck=all`, afin de détecter immédiatement les dépassements de tableau. Ce n'est qu'à la fin que vous pourrez compiler en mode optimisé `-O3`.
2. télécharger le fichier [outils.f90](#) contenant quelques modules utiles, ainsi que le squelette de code [poiseuille.f90](#) ;
3. déclarer les paramètres de la simulation, et leur donner les valeurs suivantes : $a = c = 0$, $b = d = 1$, $u_m = 1$, $a_p = 0.2$, $b_p = 0.3$, $St = 0.01$;
4. on prendra aussi un nombre de particules $n_p = 10$ pour commencer, pour passer à 10 000 quand le programme fonctionnera correctement ;
5. stocker les variables d'état des particules dans un tableau de rang 2, par exemple `part(1:4,1:np)`, où la deuxième dimension représente le numéro de la particule, et la première permet de stocker la position (indices 1 et 2), et la vitesse (indices 3 et 4) ;
6. l'initialisation des positions se fait avec la subroutine fortran


```
call random_number(part(1:2,:))
```

 qui attribue une valeur aléatoire à chaque case du tableau en argument, selon la loi uniforme entre 0 et 1 ;
7. modifier le résultat pour que les positions soient dans la bande indiquée dans l'énoncé ;
8. avant d'aller plus loin, testez votre programme et visualisez les particules avec `paraview` (observez la subroutine correspondante dans le fichier `outils.f90`, puis voir section 7.2 quelques indications pour utiliser ce logiciel) ;
9. pour visualiser le champ de vitesse du fluide porteur, il faut définir un maillage, par exemple un maillage cartésien de $i_{max} = 100$ mailles dans la direction x et $j_{max} = 100$ mailles dans la direction y , et définir les coordonnées x et y des noeuds du maillage (numérotées de 0 à i_{max} pour x et de 0 à j_{max} pour y), et les coordonnées x_c et y_c des centres des mailles (numérotées de 1 à i_{max} pour x_c et de 1 à j_{max} pour y_c) ;
10. programmer la fonction `uf(x,y)` qui calcule la vitesse du fluide porteur, selon la formule

$$u_x(x, y) = -\frac{4u_m}{(d-c)^2}(y-c)(y-d), \quad \text{et} \quad u_y(x, y) = 0$$
 et l'appliquer à toutes les mailles du maillage pour visualiser le champ avec `paraview` (à superposer aux particules) ;
11. il est maintenant temps de passer à la boucle en temps pour calculer l'évolution des particules : programmer une méthode numérique (Euler explicite pour commencer) de façon vectorielle, et déterminer un pas de temps qui garantisse la stabilité pour toutes les particules. La fonction second membre devrait être programmée dans une fonction, afin de pouvoir être réutilisée facilement pour un autre schéma. Le temps de simulation maximum sera pris à $t_{max} = (b-a)/u_m$. Il faudra faire au moins 10 sorties fichiers pendant la simulation. Le pas de temps devra donc être le minimum

entre celui donnant la stabilité et celui permettant les 10 sorties. Quand une particule sort du domaine (forcément par la droite), la faire re-renter par la gauche (condition périodique).

12. visualisez le résultat sous paraview, et quand cela fonctionne correctement, passez à $n_p = 10000$ particules.

7.1.2 Calcul de la densité numérique de particules

Dans le programme, à chaque fois que vous faites une sortie fichier, calculez une densité numérique de particules. Pour cela, utilisez le maillage défini pour visualiser le champ de vitesse du fluide porteur, et calculez une densité moyenne dans chaque maille. Stockez cette densité dans le tableau `dens(1:imax,1:jmax)` et utilisez la subroutine `sortie_densite` correspondante.

La seule difficulté ici est déterminer quelles particules se trouve dans chaque maille. Imaginez un algorithme adéquat.

Votre champ de densité (visualisé sous forme de contours) doit bien sûr être relativement proche de ce que vous voyez quand vous visualisez les particules.

Ce qui est intéressant ici et de voir l'influence de la résolution choisie : contrairement à ce que l'on pourrait croire au premier abord, il vaut mieux ne pas utiliser un maillage trop fin. Constatez qu'avec le maillage 100x100 et 10 000 particules, le champ de densité est très bruité, alors qu'il semble bien plus correct quand on prend un maillage plus grossier (par exemple 30x30).

7.1.3 Influence du rayon

Modifiez votre code pour pouvoir considérer un ensemble de particules de différents rayons. Les rayons devraient varier entre 0.001 et 1. L'inertie des particules est prise en compte dans le nombre de Stokes qui vaut maintenant $St = \frac{2}{9}r^2$. Vous pouvez générer les rayon de façon aléatoire.

Utilisez votre code sur le même problème que précédemment, et analysez l'influence du rayon des particules sur les résultats.

7.2 Aide d'utilisation de Paraview

7.2.1 Particules

- ouvrir le fichier `particules*vtk`
- choisir le « filter » « glyph »
- changer le type de glyph de « arrow » à « sphere »
- mettre le « scaling » en mode « scalar », avec un « factor » de 0.01 (pour 10 particules) ou de 0.005 (pour 10 000 particules)

7.2.2 Champ de vitesse du fluide

- ouvrir le fichier `fluide_porteur.vtk`
- pour la géométrie du domaine seulement, choisir « representation » à « outline »

- pour visualiser le champ de vitesse en norme, choisir « representation » à « surface » et « coloring » à uf

7.2.3 Visualisation de la densité

- ouvrir le fichier `densite*.vtk`
- choisir le « filter » « CellDatatoPointData », de façon à transformer les données cellule en données aux noeuds (de façon à obtenir des courbes isodensité)
- choisir le filtre « contour »
- pour avoir plusieurs contours : cliquer dans « Isosurface / Value range » sur le 3ème symbole sous les + et le -, puis choisir 10 contours
- pour avoir une couleur par contour, en fonction du niveau du champ de densité : dans « Contours by » décocher tout, puis cliquer sur « Compute scalars », et enfin plus bas dans « Coloring », choisir « Densite »

Annexe : compléments

Sommaire

1	Notations : opérateurs différentiels et vectoriels	123
2	Intégrales gaussiennes	124
3	Dérivées de la maxwellienne	129
4	L'opérateur de collision de Boltzmann	130
5	La formule du transport de Reynolds	137

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

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

2 Intégrales gaussiennes

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 $m \geq 1$.

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 $\langle V_i^2 M_0 \rangle$:

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

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

$$\begin{aligned}
\langle V_i V_j |V|^2 M_0(V) \rangle &= \langle V_i^2 |V|^2 M_0(V) \rangle \\
&= \sum_j \langle V_i^2 V_j^2 M_0 \rangle \\
&= \langle V_i^4 M_0 \rangle + \sum_{j \neq i} \langle V_i^2 V_j^2 M_0 \rangle \\
&= 3 + (d-1) \\
&= d+2,
\end{aligned} \tag{5.1}$$

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

$$\begin{aligned}
\langle |V|^6 M_0 \rangle &= \int_{S^{d-1}} \int_0^{+\infty} \frac{\zeta^6}{(2\pi)^{\frac{d}{2}}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} \zeta^{d-1} d\zeta d\omega \\
&= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{d-1}{2}}} \int_{S^{d-1}} d\omega \int_0^{+\infty} \frac{\zeta^{d+5}}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{\zeta^2}{2}} d\zeta \\
&= (d+4)(d+2)d \langle M_0 \rangle \\
&= (d+4)(d+2)d.
\end{aligned} \tag{5.2}$$

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

$$\begin{aligned}
\langle |V|^4 V_i V_j M_0 \rangle &= \langle |V|^4 V_i^2 M_0 \rangle \delta_{ij}. \\
&= \frac{1}{d} \langle |V|^4 |V|^2 M_0 \rangle \delta_{ij} = \frac{1}{d} \langle |V|^6 M_0 \rangle \delta_{ij}. \\
&= (d+4)(d+2) \delta_{ij}
\end{aligned} \tag{5.3}$$

d'après (5.2).

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

$$\langle V_i V_j V_k V_l M_0 \rangle = \delta_{ij} \delta_{kl} + \delta_{ik} \delta_{jl} + \delta_{il} \delta_{jk}. \tag{5.4}$$

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

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 5.1. *Pour toute matrice P , on a :*

$$\langle V \otimes V ((PV) \cdot V) M_0 \rangle = P + P^T + \text{Trace}(P)I. \quad (5.5)$$

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 5.1 et la relation $\delta_{kl} \partial_l u_k = \partial_k u_k = \nabla_x \cdot u$ pour trouver

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

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 5.2. *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 (5.1) et (5.3). □

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

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

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

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

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 :

$$v + v_* = v' + v'_*, \quad (5.6)$$

$$|v|^2 + |v_*|^2 = |v'|^2 + |v'_*|^2. \quad (5.7)$$

Les quantités v et $\frac{1}{2}|v|^2$ sont dites *invariants collisionels*. 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 (5.6) implique que le changement de la deuxième molécule est l'opposé du vecteur précédent : $v'_* - v_* = -A \cdot \omega$. On peut ainsi écrire v' et v'_* ainsi :

$$v' = v + A\omega, \quad \text{et} \quad v'_* = v_* - A\omega. \quad (5.8)$$

Il suffit ensuite de reporter ces expressions dans (5.7) pour obtenir la valeur $A = \omega \cdot (v_* - v)$. Les vitesses post-collisionnelles s'écrivent donc ainsi :

$$v' = v + (\omega \cdot (v_* - v))\omega, \quad \text{et} \quad v'_* = v_* - (\omega \cdot (v_* - v))\omega. \quad (5.9)$$

Nous avons donc écrit la solution du système (5.6)-(5.7) 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 :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\text{coll}} = Q(f) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_*) (f(v'_*)f(v') - f(v_*)f(v)) d\omega dv_*, \quad (5.10)$$

où l'on a omis les variables t et x dans cette expression. Cette intégrale prend en compte toutes les vitesses v_* des molécules pouvant impacter une molécule de vitesse v et toutes les changements de directions possibles ω . Le terme $B(\omega, v - v_*)f(v'_*)f(v')$ est la masse des molécules qui avaient une vitesse $v_* \pm dv_*$ avant la collision, et qui ont une vitesse v après. Le terme $B(\omega, v - v_*)f(v_*)f(v)$ est la masse des molécules qui avaient une vitesse v avant la collision, et ont une vitesse $v_* \pm dv_*$ après la collision. Le terme $B(\omega, v - v_*)$ 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 $B(\omega, v - v_*) = |\omega \cdot (v - v_*)|$. Plus généralement, B a la forme suivante

$$B(\omega, v - v_*) = |v - v_*| \Sigma(|v - v_*|, |\omega \cdot (v - v_*)| / |v - v_*|). \quad (5.11)$$

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 5.1. *Si (v', v'_\star) sont définies par (5.9), alors la vitesse relative des deux molécules ne change pas de norme durant la collision, c'est-à-dire*

$$|v' - v'_\star| = |v - v_\star|, \quad (5.12)$$

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

$$(v' - v'_\star) \cdot \omega = -(v - v_\star) \cdot \omega. \quad (5.13)$$

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 (5.6) à deux fois (5.7) pour trouver (5.12). Ensuite, on retranche les deux égalités de (5.9) : on trouve $v' - v'_\star = (I_3 - 2\omega\omega^T)(v - v_\star)$, 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 (5.13). \square

À présent, nous allons voir que les lois de conservations microscopiques (5.6) et (5.7) 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 5.2. *Pour toute fonction ϕ de v , on a :*

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v) Q(f) dv \\ &= \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_\star) (f(v'_\star) f(v') - f(v_\star) f(v)) (\phi(v_\star) + \phi(v) - \phi(v'_\star) - \phi(v')) d\omega dv_\star dv. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Démonstration. Cette relation s'obtient en faisant plusieurs changements de variables astucieux pour obtenir 4 expressions équivalentes du membre de gauche de (5.14). 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 (5.9) liant les vitesses avant et après collision sous la forme fonctionnelle suivante. Pour v et v_\star données, on note $C^\omega(v, v_\star) \in \mathbb{R}^2$ défini par

$$\begin{aligned} C_1^\omega(v, v_\star) &= v + (\omega \cdot (v_\star - v))\omega \\ C_2^\omega(v, v_\star) &= v_\star - (\omega \cdot (v_\star - v))\omega. \end{aligned} \quad (5.15)$$

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

Expression 1.

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v)Q(f) dv \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_*) \left(f(C_2^\omega(v, v_*))f(C_1^\omega(v, v_*)) - f(v_*)f(v) \right) \phi(v) d\omega dv_* dv. \end{aligned} \quad (5.16)$$

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 (5.15), 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 (5.11)), 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

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v)Q(f) dv \\ &= \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_*) \left(f(C_2^\omega(v, v_*))f(C_1^\omega(v, v_*)) - f(v_*)f(v) \right) \phi(v_*) d\omega dv_* dv. \end{aligned} \quad (5.17)$$

On retrouve la même expression que (5.16), 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 (5.7), 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 (5.12) et (5.13) et la définition de B (voir (5.11)), 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 $(v, v_\star) = C(v', v'_\star)$. Ainsi, (5.16) se transforme en

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

Pour comparer à (5.16), nous faisons un nouveau changement de notation : on enlève les primes ! Autrement dit, v'_\star et v' sont à présent notées v_\star et v . Il vient :

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

Enfin, après un réarrangement des termes, nous obtenons

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v)Q(f) dv \\ &= - \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v_\star - v) \left(f(C_2^\omega(v, v_\star)) f(C_1^\omega(v, v_\star)) - f(v_\star) f(v) \right) \phi(C_1^\omega(v, v_\star)) d\omega dv_\star dv, \end{aligned} \tag{5.18}$$

ce qui n'est autre que (5.16) avec le signe moins et $\phi(C_1^\omega(v, v_\star))$ à la place de $\phi(v)$.

Expression 4.

Il nous reste à faire apparaître $\phi(C_2^\omega(v, v_\star))$, ce qui va se faire simplement par un nouveau changement de notation : partons de (5.18) et échangeons v et v_\star . Nous trouvons

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

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

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

Puis un dernier réarrangement donne

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \phi(v)Q(f) dv \\ &= - \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_\star) \left(f(C_2^\omega(v, v_\star)) f(C_1^\omega(v, v_\star)) - f(v_\star) f(v) \right) \phi(C_2^\omega(v, v_\star)) d\omega dv_\star dv \end{aligned} \tag{5.19}$$

qui n'est autre que (5.16) avec le signe moins et $\phi(C_2^\omega(v, v_\star))$ à la place de $\phi(v)$.

Il suffit alors de prendre la moyenne des 4 relations (5.16)–(5.19) pour obtenir la forme faible (5.14), 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 5.3. *L'opérateur de collision de Boltzmann satisfait les relations suivantes, pour toute fonction f :*

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

Démonstration. C'est une conséquence de la propriété 5.2 et des lois de conservations microscopiques (5.6) et (5.7) : il suffit de choisir successivement $\phi(v) = 1$, v , puis $\frac{1}{2}|v|^2$ dans (5.14) 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 (5.6) et (5.7). \square

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 5.4. *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 (5.14) mais avec $\phi = \ln f$. Il vient

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^3} \ln f Q(f) dv \\ &= \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_\star) (f(v'_\star) f(v') - f(v_\star) f(v)) \\ & \quad \times (\ln f(v_\star) + \ln f(v) - \ln f(v'_\star) - \ln f(v')) d\omega dv_\star dv \\ &= \frac{1}{4} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \int_{S^2} B(\omega, v - v_\star) (f(v'_\star) f(v') - f(v_\star) f(v)) (\ln f(v_\star) f(v) - \ln f(v'_\star) f(v')) d\omega dv_\star dv, \end{aligned} \tag{5.20}$$

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 1.3.

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 (1.10)) 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 (5.6)-(5.7).

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 5.4, 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 5.3 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 [3] et de notes de F. Golse [10].

Lemme 5.3. *Soit une fonction ϕ invariant collisionnel, c'est-à-dire telle que*

$$\phi(v) + \phi(v_\star) = \phi(v') + \phi(v'_\star), \quad (5.21)$$

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 (5.15). 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

$$w + w_\star = v + v_\star \quad \text{et} \quad |v|^2 + |v_\star|^2 = |w|^2 + |w_\star|^2. \quad (5.22)$$

Alors l'analyse faite pour obtenir (5.9) 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 (5.22). 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 (5.22), et donc $\phi(w) + \phi(w_\star) = \phi(v) + \phi(v_\star)$, 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 jusque'ici : il existe une fonction T telle que

$$\phi(x) + \phi(y) = T(x + y, |x|^2 + |y|^2). \quad (5.23)$$

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 (5.23) par rapport à x_i : il vient

$$\partial_i \phi(x) = \partial_i T + 2x_i \partial_\beta T, \quad (5.24)$$

où l'on omet les arguments de T quand il n'y a pas d'ambiguïté. Dérivons maintenant (5.23) par rapport à y_i : il vient

$$\partial_i \phi(y) = \partial_i T + 2y_i \partial_\beta T. \quad (5.25)$$

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

$$\partial_i \phi(x) - \partial_i \phi(y) = 2(x_i - y_i) \partial_\beta T. \quad (5.26)$$

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

$$\partial_j \phi(x) - \partial_j \phi(y) = 2(x_j - y_j) \partial_\beta T. \quad (5.27)$$

On peut maintenant éliminer le terme $\partial_\beta T$ en calculant $(x_j - y_j)(5.26) - (x_i - y_i)(5.27)$ pour obtenir

$$(x_j - y_j)(\partial_i \phi(x) - \partial_i \phi(y)) = (x_i - y_i)(\partial_j \phi(x) - \partial_j \phi(y)). \quad (5.28)$$

Avec cette relation, il est possible de montrer que $\partial_i \partial_j \phi = 0$. Il suffit pour cela de dériver une première fois (5.28) par rapport à x_i , ce qui donne

$$(x_j - y_j) \partial_i^2 \phi(x) = (\partial_j \phi(x) - \partial_j \phi(y)) + (x_i - y_i) \partial_i \partial_j \phi(x), \quad (5.29)$$

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

$$0 = -\partial_i \partial_j \phi(y) - \partial_i \partial_j \phi(x). \quad (5.30)$$

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

$$\partial_i \partial_j \phi \equiv 0, \quad \text{pour tout } i \neq j. \quad (5.31)$$

Il reste à obtenir des informations sur $\partial_i^2 \phi$: pour cela, revenons à la relation (5.29) qui s'écrit, compte tenu de (5.31),

$$(x_j - y_j) \partial_i^2 \phi(x) = \partial_j \phi(x) - \partial_j \phi(y). \quad (5.32)$$

Dérivons cette relation par rapport à y_j pour trouver

$$-\partial_i^2 \phi(x) = -\partial_j^2 \phi(y). \quad (5.33)$$

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

$$\partial_i^2 \phi(x) = c \quad (5.34)$$

où c est une constante indépendant de x et de i . On peut enfin rassembler (5.31) et (5.34) 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 5.1. 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.

5 La formule du transport de Reynolds

Dans cette section, nous montrons comment on peut dériver par rapport au temps une expression comme (4.3), dans laquelle le temps apparaît à la fois dans l'intégrande et dans le domaine d'intégration. La difficulté essentielle étant la dépendance du domaine d'intégration par rapport au temps, on va utiliser un changement de variables qui élimine cette dépendance.

L'outil essentiel utilisé ici est le changement de variables lagrangien qui a tout état initial (x_0, v_0, r_0, T_0) d'une particule associe l'état (x, v, r, T) qu'elle occupe à l'instant t . Pour cela, nous avons besoin de quelques notations supplémentaires. Les équations d'évolution (4.1) et (4.2) d'une particule peuvent se noter sous la forme du système

$$X'(t) = \mathcal{F}(t, X(t)), \quad (5.35)$$

où $X(t) = (x(t), v(t), r(t), T(t))$ et $\mathcal{F}(t, X) = (v, \frac{1}{m_p} F(t, X), K(t, X), H(t, X))$. L'état $X = (x, v, r, T)$ de la particule à l'instant t associé à l'état initial $X_0 = (x_0, v_0, r_0, T_0)$ peut se noter $X = X(t; X_0)$, ce qui signifie que X est la valeur en t de la solution de (5.35) de donnée initiale X_0 .

Nous notons alors $\Phi(t, \cdot)$ le changement de variable lagrangien, qui est l'application suivante :

$$\Phi(t, \cdot) : X_0 \mapsto X = X(t; X_0).$$

Rappelons alors que nous avons défini Ω_0 un volume dans l'espace des phases qui contient des particules à l'instant initial, et $\Omega(t)$ le volume qui à l'instant t contient toutes les particules qui étaient dans Ω_0 à l'instant initial, et uniquement celles-ci. Avec les notations précédentes, $\Omega(t)$ s'écrit de la façon suivante

$$\Omega(t) = \{X = \Phi(t, X_0), \quad \text{où} \quad X_0 \in \Omega_0\}.$$

Ainsi, le nombre de particules $N(t)$ dans $\Omega(t)$ peut se ré-écrire en utilisant le changement de variables précédent. On a

$$N(t) = \int_{\Omega(t)} f(t, x, v, r, T) dx dv dr dT = \int_{\Omega(t)} f(t, X) dX$$

où $dX = dx dv dr dT$, et l'on remplace alors X par $\Phi(t, X_0)$, où X_0 est dans Ω_0 , et l'on a $dX = J(t, X_0) dX_0$, où J est le jacobien de cette transformation, c'est-à-dire $J(t, X_0) = |\det(D_X \Phi(t, X_0))|$, où $D_X \Phi$ désigne la dérivée de Φ par rapport à sa seconde variable. Ainsi, on trouve

$$N(t) = \int_{\Omega_0} f(t, \Phi(t, X_0)) J(t, X_0) dX_0.$$

La variable t a disparu du domaine d'intégration, et elle apparaît maintenant uniquement dans l'intégrande (dans f et dans le jacobien).

À présent, il suffit de dériver sous l'intégrale pour obtenir

$$\begin{aligned} N'(t) &= \int_{\Omega_0} \frac{d}{dt} (f(t, \Phi(t, X_0)) J(t, X_0)) dX_0 \\ &= \int_{\Omega_0} \left(\frac{d}{dt} f(t, \Phi(t, X_0)) \right) J(t, X_0) dX_0 + \int_{\Omega_0} f(t, \Phi(t, X_0)) \frac{d}{dt} J(t, X_0) dX_0 \\ &= \int_{\Omega_0} (\partial_t f(t, \Phi(t, X_0)) + \partial_t \Phi(t, X_0) \cdot \nabla_X f(t, \Phi(t, X_0))) J(t, X_0) dX_0 \\ &\quad + \int_{\Omega_0} f(t, \Phi(t, X_0)) \partial_t J(t, X_0) dX_0 \\ &= I_1 + I_2. \end{aligned} \tag{5.36}$$

Pour la première intégrale, remarquons que $\partial_t \Phi(t, X_0) = \mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0))$. En effet, d'après la définition de Φ , on a

$$\begin{aligned} \partial_t \Phi(t, X_0) &= \lim_{h \rightarrow 0} (\Phi(t+h, X_0) - \Phi(t, X_0))/h \\ &= \lim_{h \rightarrow 0} (X(t+h) - X(t))/h \\ &= X'(t) = \mathcal{F}(t, X(t)) = \mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0)). \end{aligned}$$

Donc I_1 s'écrit

$$I_1 = \int_{\Omega_0} (\partial_t f(t, \Phi(t, X_0)) + \mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0)) \cdot \nabla_X f(t, \Phi(t, X_0))) J(t, X_0) dX_0.$$

On peut alors faire le changement de variables inverse pour obtenir

$$I_1 = \int_{\Omega(t)} (\partial_t f(t, X) + \mathcal{F}(t, X) \cdot \nabla_X f(t, X)) dX. \quad (5.37)$$

Pour la deuxième intégrale I_2 , il faut pouvoir calculer la dérivée du jacobien de la transformation lagrangienne par rapport au temps. Pour le moment, oublions la valeur absolue et notons $\mathcal{J}(t, X_0) = \det(D_X \Phi(t, X_0))$: on a alors

$$\begin{aligned} \partial_t \mathcal{J}(t, X_0) &= \det'(D_X \Phi(t, X_0))(\partial_t(D_X \Phi(t, X_0))) \\ &= \det'(D_X \Phi(t, X_0))(D_X(\partial_t \Phi(t, X_0))) \\ &= \det'(D_X \Phi(t, X_0))(D_X(\mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0)))), \end{aligned} \quad (5.38)$$

où l'on a noté $\det'(A)(B)$ la dérivée du déterminant calculée en la matrice $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ et appliquée à la matrice B . Au lieu d'utiliser directement la formule donnant la dérivée du déterminant, nous utilisons un lemme classique (tiré des notes de F. Golse [9]) :

Lemme 5.4. *Si A est inversible, alors on a pour toute matrice B*

$$\det'(A)(B) = \det(A) \text{Trace}(A^{-1}B).$$

On a ainsi

$$\begin{aligned} \partial_t \mathcal{J}(t, X_0) &= \det(D_X \Phi(t, X_0)) \text{Trace}((D_X \Phi(t, X_0))^{-1} D_X(\mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0)))) \\ &= \mathcal{J}(t, X_0) \text{Trace}((D_X \Phi(t, X_0))^{-1} (D_X \mathcal{F})(t, \Phi(t, X_0)) (D_X \Phi(t, X_0))) \\ &= \mathcal{J}(t, X_0) \text{Trace}((D_X \mathcal{F})(t, \Phi(t, X_0))) \\ &= \mathcal{J}(t, X_0) \nabla_X \cdot \mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0)). \end{aligned} \quad (5.39)$$

Avant de conclure, il faut montrer comment passer de $\partial_t \mathcal{J}(t, X_0)$ à $\partial_t J(t, X_0)$. Il suffit pour cela de remarquer que la relation précédente donne un signe à \mathcal{J} . En effet, \mathcal{J} suit une équation différentielle à coefficients non constants qui donne

$$\mathcal{J}(t, X_0) = \mathcal{J}(0, X_0) \exp \left(\int_0^t \nabla_X \cdot \mathcal{F}(s, \Phi(s, X_0)) ds \right).$$

Comme $\mathcal{J}(0, X_0) = \det D_X \Phi(0, X_0)$ et que $\Phi(0, X_0) = X_0$, on a $D_X \Phi(0, X_0) = I$, et donc $\mathcal{J}(0, X_0) = 1$. Ainsi, $\mathcal{J}(t, X_0) > 0$ pour tout t , et donc $J(t, X_0) = \mathcal{J}(t, X_0)$. Par conséquent, la relation (5.39) est aussi valable pour $J(t, X_0)$ et l'on a donc

$$\partial_t J(t, X_0) = J(t, X_0) \nabla_X \cdot \mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0)). \quad (5.40)$$

Nous pouvons à présent revenir à l'intégrale I_2 pour écrire

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_{\Omega_0} f(t, \Phi(t, X_0)) \partial_t J(t, X_0) dX_0 \\ &= \int_{\Omega_0} f(t, \Phi(t, X_0)) \nabla_X \cdot (\mathcal{F}(t, \Phi(t, X_0))) J(t, X_0) dX_0. \end{aligned}$$

En faisant le changement de variable inverse, on obtient donc

$$I_2 = \int_{\Omega(t)} f(t, X) \nabla_X \cdot (\mathcal{F}(t, X)) dX. \quad (5.41)$$

On peut enfin revenir à l'expression (5.36) en utilisant (5.37) et (5.41) pour trouver

$$\begin{aligned} N'(t) &= \int_{\Omega(t)} (\partial_t f(t, X) + \mathcal{F}(t, X) \cdot \nabla_X f(t, X) + f(t, X) \nabla_X \cdot (\mathcal{F}(t, X))) dX \\ &= \int_{\Omega(t)} (\partial_t f(t, X) + \nabla_X \cdot (\mathcal{F}(t, X) f(t, X))) dX \\ &= \int_{\Omega(t)} \partial_t f + \nabla_x \cdot (vf) + \nabla_v \cdot \left(\frac{F}{m_p} f\right) + \partial_r(Kf) + \partial_T(Hf) dx dv dr dT, \end{aligned}$$

ce qui est bien la formule de Reynolds recherchée.

Preuve du lemme 5.4. Notons que

$$\det'(A)(B) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\det(A + \varepsilon B) - \det(A)) / \varepsilon.$$

Or $\det(A + \varepsilon B) = \det(A(I + \varepsilon A^{-1}B)) = \det A \det(I + \varepsilon A^{-1}B)$, donc

$$\det'(A)(B) = \det A \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\det(I + \varepsilon A^{-1}B) - 1) / \varepsilon = \det A \det'(I)(A^{-1}B). \quad (5.42)$$

En notant de façon générale pour toute matrice $M = [M_1, M_2, \dots, M_n]$ où M_i est la i ème colonne de M , on rappelle que le déterminant étant une application n -linéaire, sa dérivée s'écrit

$$\det'(M)(N) = \det[N_1, M_2, \dots, M_n] + \det[M_1, N_2, M_3, \dots, M_n] + \dots + \det[M_1, M_2, \dots, N_n].$$

Ainsi, en remarquant que la matrice identité s'écrit $I = [e_1, e_2, \dots, e_n]$, où e_i est le i ème vecteur de la base canonique, on trouve

$$\begin{aligned} \det'(I)(A^{-1}B) &= \det[(A^{-1}B)_1, e_2, \dots, e_n] + \det[e_1, (A^{-1}B)_2, e_3, \dots, e_n] \\ &\quad + \dots + \det[e_1, e_2, \dots, e_{n-1}, (A^{-1}B)_n]. \end{aligned}$$

En développant colonne par colonne, on trouve $\det[e_1, e_2, \dots, e_{i-1}, x(A^{-1}B)_i, e_{i+1}, \dots, e_n] = (A^{-1}B)_{i,i}$ pour tout i , d'où

$$\det'(I)(A^{-1}B) = \sum_{i=1}^n (A^{-1}B)_{i,i} = \text{Trace}(A^{-1}B).$$

En injectant cette relation dans (5.42), on trouve le résultat attendu. □

matières (rendu nécessaire par hyperref)

Bibliographie

- [1] [https://en.wikipedia.org/wiki/KIVA_\(software\)](https://en.wikipedia.org/wiki/KIVA_(software)).
- [2] G.A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. Oxford Science Publications, 1994.
- [3] L. Boltzmann. *Lectures on gas theory*. Dover, 1964.
- [4] I. D. Boyd and T. E. Schwartzentruber. *Nonequilibrium gas dynamics and molecular simulation*. Cambridge Aerospace Series. Cambridge University Press, Cambridge, 2017.
- [5] 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.
- [6] S. Dellacherie. Construction and properties of lbm algorithms for the 1d convection-diffusion equation. https://sites.google.com/site/stephanedellacherie/expose/beamer_LBM_cachan_avril_2013.pdf.
- [7] G. Dimarco and L. Pareschi. Numerical methods for kinetic equations. *Acta Numer.*, 23 :369–520, 2014.
- [8] F. Dubois. Une introduction au schema de Boltzmann sur réseau. *ESAIM : PROCEEDINGS*, 18 :181–215, 2007.
- [9] F. Golse. Mean field kinetic equations. www.mathpolytechnique.fr/~golse/M2/PolyKinetic.pdf.
- [10] 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.
- [11] X. He and L.-S. Luo. Theory of the lattice Boltzmann method : from the Boltzmann equation to the lattice Boltzmann equation. *Physical review E*, 56(6), 1997.
- [12] M. Junk, A. Klar, and L.-S. Luo. Asymptotic analysis of the lattice Boltzmann equation. *Journal of Computational Physics*, 210 :676–704, 2005.
- [13] D. L. Marchisio and R. O. Fox. *Computational Models for Polydisperse Particulate and Multiphase Systems*. Cambridge Series in Chemical Engineering. Cambridge University Press, 2013.
- [14] 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.

- [15] L. Mieussens. A survey of deterministic solvers for rarefied flows. *AIP Conference Proceedings*, 1628(1) :943–951, 2014.
- [16] M. F. Modest. *Radiative heat transfer*. Academic Press, 2003.
- [17] A. Murrone and P. Villedieu. Numerical modelling of dispersed two-phase flows. *Journal Aerospace Lab*, 2, 2011.
- [18] Y. H. Qian, D. D’Humières, and P. Lallemand. Lattice BGK models for Navier-Stokes equation. *Europhys. Lett.*, 17(6) :479–484, 1992.
- [19] L. Schneider. *A concise moment method for unsteady polydisperse sprays*. PhD thesis, der Technischen Universität Darmstadt, 2009.
- [20] F. Véron. Ocean spray. *Annual Reviews Fluid Mech.*, 2015.
- [21] F. Véron and L. Mieussens. An Eulerian model for sea spray transport and evaporation. *Journal of Fluid Mechanics*, 897 :A6, 2020. lien : https://www.math.u-bordeaux.fr/~lmieusse/PAGE_WEB/PUBLICATIONS/2019/Paper_Kinetic_Rev3air.pdf.