

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI, TIZI-OUZOU

FACULTE DES : Sciences
DEPARTEMENT DE : Physique

MEMOIRE DE MAGISTER

SPECIALITE : Physique
OPTION : Physique Des Matériaux

Présenté par :
Lynda Oussaid

Sujet :

**Calcul des coefficients de transport d'un plasma thermique par
la méthode de Chapman-Enskog, application au PA66**

Devant le jury d'examen composé de :

LAMROUS Omar ;	Professeur ;	U.M.M.T.O ;	Président.
MITICHE Moh Djerdjer ;	Maitre de Conférence A ;	U.M.M.T.O ;	Rapporteur.
SADAOUI Youcef ;	Maitre de Conférence A ;	U.M.M.T.O ;	Examineur.
MOKDAD Rabah ;	Maitre de Conférence A ;	U.M.M.T.O ;	Examineur.

Soutenu le 13/07/2011

Remerciements :

Ce travail a été effectué au laboratoire de Physique et Chimie Quantique (L.P.C.Q) de l'université de Mouloud Mammeri de Tizi-Ouzou (U.M.M.T.O) sous la direction de Monsieur Moh Djerdjer Mitiche.

Je remercie Monsieur Said BOUARAB, professeur à l' U.M.M.T.O et directeur du L.P.C.Q qui m'a accueilli au sein du laboratoire.

Je tiens à exprimer toute ma gratitude à Monsieur Moh Djerdjer MITICHE (MCF à l'U.M.M.T.O) pour son aide précieuse, pour ses commentaires et les diverses discussions scientifiques que nous avons eu ensemble. Il m'a été d'un apport considérable durant la réalisation de ce mémoire.

Je remercie Monsieur Omar LAMROUS, professeur à l'U.M.M.T.O, d'avoir accepté de présider mon jury, je le remercie également de m'avoir intégré dans son équipe.

Je suis très sensible à l'honneur que m'ont fait M. Rabah MOKDAD (MCF à l'UMMTO) et M. Youcef SADAoui (MCF à l'UMMTO) d'avoir accepté de juger mon travail et pour leur participation à mon jury. Je les remercie très sincèrement.

Je tiens à exprimer mes sincères remerciements au Professeur Pascal ANDRE directeur du Laboratoire d'Arc Electrique et Plasmas Thermiques (LAEPT) de l'université Blaise Pascal, pour la documentation qu'il a mis à ma disposition, et qui m'a été d'une aide précieuse pour la réalisation de ce travail.

Mes remerciements vont également à Monsieur Bernard PATEYRON ingénieur de recherche au sein du laboratoire Sciences des Procédés Céramiques et Traitement des Surfaces (SECTS) de l'université de Limoges pour sa disponibilité. Grâce à lui j'accède régulièrement au logiciel T & TWinner (Thermodynamique + Transports), m'ayant servi de base de données et de références.

Je tiens à remercier toutes les personnes qui m'ont aidé de près ou de loin à la réalisation de ce travail, en particulier les membres du L.P.C.Q.

Je remercie toutes les personnes qui me sont chères, en particulier mes parents et tous les membres de ma famille sans oublier tous mes amis pour l'aide et le soutien dont ils ont fait preuve tout au long de mes années universitaires.

Enfin, je ne saurais terminer ces remerciements sans évoquer toute l'aide et le réconfort que j'ai trouvés dans les moments difficiles auprès de mon mari.

Table des matières

Introduction générale	4
1 Généralité sur les plasmas	7
1.1 Introduction	7
1.2 Notions d'équilibre thermodynamique	7
1.3 Distribution de Maxwell. Température dans le plasma	9
1.4 Différents types de plasmas	11
1.4.1 Plasmas naturels	11
1.4.2 Plasmas artificiels	12
1.5 Plasmas thermiques et appareils de coupure	12
1.5.1 Arc électrique et plasmas thermiques	13
1.5.2 Appareils de coupure ou disjoncteurs	14
1.6 Propriétés thermodynamiques et coefficients de transport	15
1.6.1 Composition chimique	15
1.6.2 Coefficients de transport	15
2 Solution de Chapman-Enskog de l'équation de Boltzmann	23
2.1 Fonction de distribution	23
2.2 Vitesses moléculaires	24
2.2.1 Vitesse moyenne de masse	24
2.2.2 Vitesse particulière de l'espèce j	25
2.2.3 Vitesse réduite	25
2.2.4 Vitesse initiale réduite	25
2.3 Vecteur flux	26
2.3.1 Flux de masse	27
2.3.2 Flux de quantité de mouvement	27
2.3.3 Flux d'énergie cinétique	28
2.4 Equations de transfert	28
2.4.1 Expressions explicites des equations de transfert	29
2.5 Solution d'Enskog de l'équation de Boltzmann	31
2.5.1 Théorème-H (solution d'équilibre)	31
2.5.2 Série d'Enskog	33
2.5.3 Solution de perturbation d'ordre un	35
2.6 Equations intégrales	37
2.6.1 Théorèmes importants sur les intégrales	40

2.7	Principe variationnel	42
2.7.1	Application du principe variationnel (développement polynômial de Sonine)	43
3	Formulation des coefficients de transport	47
3.1	Coefficients de diffusion et de diffusion thermique en fonction des coefficients du développement de Sonine	47
3.2	Coefficient de viscosité en fonction des coefficients du développement de Sonine . .	49
3.3	Coefficient de conductibilité thermique en fonction des coefficients du développement de Sonine	51
3.4	Les intégrales de collision $\Omega^{(l,s)}$	55
3.5	Expressions des coefficients de transport en fonction des intégrales de collision $\Omega^{(l,s)}$	55
3.5.1	Coefficient de diffusion	55
3.5.2	Coefficient de diffusion thermique	56
3.5.3	Coefficient de viscosité	57
3.5.4	Coefficient de conductivité thermique	58
3.5.5	Coefficient de conductivité électrique	59
4	Procédure de calcul et interprétation des résultats	62
4.1	Expressions utilisées pour le calcul des coefficients de transport	63
4.1.1	Conductivité électrique	63
4.1.2	Coefficient de viscosité	64
4.1.3	Coefficient de conductivité thermique	65
4.2	Données de base utilisés dans le calcul	68
4.2.1	Fractions molaires x_i des espèces en fonction de la température	68
4.2.2	Concentrations des espèces en fonction de la température	68
4.2.3	Intégrales de collision	69
4.3	Algorithme de calcul	70
4.4	Résultats et discussions	74
4.4.1	Evolution des coefficients de transport en fonction de la température pour une pression de 1 atm	74
4.5	Validation du code de calcul	77
4.5.1	Conductivité électrique	77
4.5.2	Influence de la pression	77
4.5.3	Conductivité électrique et capacité d'interruption d'un disjoncteur	78
	Conclusion	82
	Bibliographie	82

Introduction générale

Le développement des applications industrielles des plasmas n'ont pas cessé d'augmenter ces dernières décennies, en particulier dans le domaine des appareillages de coupure, le traitement des surfaces et la destruction des déchets. Ces progrès ont nécessité et nécessiteront toujours une forte connaissance des processus de transport (énergie, quantité de mouvement, matière...etc.) au sein du plasma et ceux résultant de l'interaction plasma-matériaux.

La diffusion, la viscosité, les conductivités électrique et thermique sont liées à quelques propriétés physiques du gaz. La diffusion représente le transfert de masse d'une région à une autre dû à un gradient de concentration (diffusion ordinaire) ou à un gradient de température (diffusion thermique), la viscosité est le transport de quantités de mouvement dû au gradient de vitesse, la conductivité thermique est le transport de l'énergie thermique résultant de la présence des gradients de température, des réactions chimiques ou à des degrés de liberté internes dus aux vibrations et rotation des molécules dans le plasma. La conductivité électrique est le transport des électrons et des ions dus aux gradients de concentration, de pression et de température.

L'objectif de ce travail est de développer et de valider un code de calcul des coefficients de transport des plasmas d'isolants dans les gammes de température (5 000 à 20 000 K) et de pression (1 à 10 atm) qui couvrent largement le domaine de fonctionnement des disjoncteurs à parois ablatives. Les coefficients de transport dépendent de la composition d'équilibre et des intégrales de collision entre les différentes particules prises deux à deux. Ces coefficients sont calculés au moyen d'expressions déduites de la résolution de l'équation intégral-différentielle de Boltzmann par la méthode de Chapman-Enskog. Le calcul de composition d'équilibre du plasma d'isolant constitue une première approche du milieu étudié, en permettant de connaître l'importance relative de la population des différentes espèces chimiques en présence et leur évolution en fonction de la température et de la pression. Cette étude a été précédemment faite au sein du laboratoire de recherche *LPCQ* dans le cadre d'un mémoire de magister.

Cette étude est appliquée aux plasmas issus de la vaporisation de matériaux thermoplastiques car les propriétés de transport ont été calculées pour mettre en évidence l'influence de la nature du matériau. Nous sommes intéressés particulièrement aux interactions arc-parois et donc au rôle joué par les vapeurs d'isolants sur les performances des appareils de coupure. Le choix du polyamide 66 (abrégé en PA66), ayant comme formule chimique $C_{12}H_{22}O_2N_2$, a été guidé par le fait que ce matériau est couramment employé dans l'industrie d'appareillage de coupure. En effet, les appareils de coupure sont amenés à couper le courant en un intervalle de temps réduit. Lors de l'ouverture des contacts, il y a une formation d'un arc électrique, qui s'accompagne de

l'évaporation du matériau constituant le boîtier du disjoncteur [1], d'où la formation d'un plasma formé essentiellement de vapeur d'isolant. La présence de ces vapeurs modifie profondément les priorités physique du plasma [2, 3] d'arc. Dans le but d'améliorer les performances des appareils de coupure, les chercheurs se sont intéressés depuis quelques années aux interactions arc-parois et donc au rôle joué par les vapeurs d'isolant sur les caractéristiques de l'arc.

Dans le premier chapitre nous avons fait un rappel général sur les plasmas et sur les notions d'équilibre thermodynamique. Une simple explication sur le fonctionnement d'un disjoncteur basse tension, nous avons terminer le chapitre avec les définitions de base des phénomènes de transport.

Nous avons établi au second chapitre les expressions intégrales des vecteurs flux, qui décrivent le flux de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Le calcul des ces intégrales exige la connaissance de la fonction de distribution f_i . La méthode de Chapman-Enskog fait l'objet de ce chapitre, nous avons donné toutes les définitions nécessaires pour comprendre la solution de Chapman-Enskog de l'équation de Boltzmann.

Dans le troisième chapitre, nous avons utiliser les expression des flux obtenu dans le chapitre deux pour trouver celles des coefficients de transport. Ces dernières sont exprimés en fonction des intégrales de collision. Ainsi nous avons donné toutes les relations nécessaires pour le calcul de la conductivité électrique, du coefficient de viscosité et de la conductivité thermique.

Dans le dernier chapitre, nous avons consacré une partie de ce chapitre pour exposer toutes les sources des données de base qui sont utilisées dans le calcul des coefficients de transport. Puis nous avons développer le contenu du code de calcul qui est réalisé en langage Fortran. Et enfin, nous avons terminé le chapitre par l'expositions des résultats et leurs interprétations.

Chapitre 1

Généralité sur les plasmas

1.1 Introduction

Le plasma est le quatrième état de la matière, faisant suite dans l'échelle des températures aux trois états classiques, solide, liquide et gaz. 99 % notre univers est à l'état plasma, un exemple type de plasma est le soleil, dont sa température intérieur dépasse $10^7 K$. Une telle grande énergie comparée à celle des solides, ou les gaz ordinaires, lui apporte un nombre d'application très important [13].

Un plasma est un milieu gazeux constitué de molécules d'atomes, d'ions, d'électrons et de photons. L'ensemble est généralement supposé électriquement neutre.

On peut caractériser l'état d'un gaz ionisé en état d'équilibre par les trois grandeurs :

- La densité des porteurs de charge n ;
- La température absolue T ;
- Le degré d'ionisation α , qui est le rapport de la densité de porteurs de charge sur la densité totale du plasma, il est donné comme par la relation[14] :

$$\alpha = \frac{n}{n + n_0} \quad \text{avec} \quad n = n_i = n_e$$

n_i : densité des ions ;

n_e : densité des électrons ;

n_0 : densité des neutres.

On peut classer les gaz ioniser selon les valeurs de α [14] :

- Gaz faiblement ionisés pour $\alpha < 10^4$;
- Gaz fortement ionisés pour $\alpha > 10^4$;
- et pour $\alpha = 1$ on dit que le gaz est totalement ionisé.

1.2 Notions d'équilibre thermodynamique

D'une manière générale, un état d'équilibre thermodynamique est caractérisé par l'absence de toute modification. L'état microscopique du plasma peut être décrit au moyen des variables ma-

croscopiques (température) en utilisant les lois statistiques. L'état microscopique est caractérisé par des fonctions de distribution qui définissent différents types de températures [16].

Température de translation (T_{tr}) : Elle est définie par une distribution maxwellienne des vitesses de chaque espèce du plasma.

Température de d'excitation (T_{exc}) : Une distribution de Boltzmann, donnant la population des niveaux excités d'un atome, qui définit une température d'excitation atomique (T_{exc}^{at}). Dans le cas des molécules, les températures d'excitation diatomique (T_{exc}^{dia}), de rotation (T_{rot}) et de vibration (T_{vib}) interviennent.

Température de réaction (T_{reac}) : Elle intervient dans l'équilibre des réactions d'ionisation-recombinaison et de dissociation-recombinaison donné par les lois d'action de masse.

Température de radiation (T_{rad}) : Elle est définie comme une distribution spectrale du rayonnement émis suivant la loi de Planck.

Le plasma est dit en équilibre thermodynamique complet (ETC) lorsque toutes les fonctions de distribution sont définies par une température unique T . A l'ETC, toutes les températures énoncées précédemment sont identiques :

$$T_{tr} = T_{exc}^{at} = T_{exc}^{dia} = T_{rot} = T_{vib} = T_{reac} = T_{rad}$$

L'équilibre thermodynamique complet n'est en générale pas applicable dans le cas des plasmas de laboratoire. Où l'écart de l'ETC est principalement dû à la perte d'énergie sous forme de radiation qui ne sont pas réabsorbés dans les limites du plasma. Ainsi, la loi de Planck n'est pas vérifiée. On définit alors un équilibre thermodynamique local (ETL) où toutes les lois de l'ETC, hormis celle de Planck, s'appliquent localement :

$$T^{tr} = T_{exc}^{at} = T_{exc}^{dia} = T_{rot} = T_{vib} = T_{reac} \neq T_{rad}$$

L'ETL requiert que ce sont les processus collisionnels (et non les processus radiatifs) qui gouvernent les transitions et les réactions dans le plasma. Il requiert aussi que les gradients locaux du plasma (température, densité, conductivité thermique) soient suffisamment faibles.

La notion d'équilibre thermodynamique partiel (ETLP) a également été introduite pour définir un état dans lequel les populations des niveaux excités peuvent dévier de la distribution idéale de Boltzmann.

1.3 Distribution de Maxwell. Température dans le plasma

L'énergie thermique dans le plasma, comme dans quelques milieux gazeux, est définie par l'énergie cinétique moyenne de la particule (molecule, atome, ion, ou électron) c.à.d :

$$\frac{1}{2}m\overline{v^2} = \frac{3}{2}kT \quad (1.1)$$

m : la masse de la particule.

k : la constante de Boltzmann.

T : la température absolue.

v : la vitesse de la particule.

l'équation (1.1) implique que les particules suivent une distribution de Maxwell-Boltzmann. Le nombre de particules dont les vitesses sont comprises entre v et $v + dv$ est donné par :

$$dn_v = n f(v) dv \quad (1.2)$$

avec :

$$f(v) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2kT}{m} \right)^{\frac{3}{2}} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) \quad (1.3)$$

La fonction de distribution $f(v)$ atteint son maximum à $v_m = \sqrt{\frac{2kT}{m}}$ et la vitesse moyenne pour cette distribution est donnée par :

$$\bar{v} = \int_0^{\infty} v f(v) dv = \left(\frac{8kT}{\pi m} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.4)$$

La distribution de Maxwell-Boltzmann des particules dans un plasma ou simplement dans un gaz, dépend fortement des collisions entre particules, c.à.d, des fréquences de collision et de l'énergie d'échange durant la collision. En appliquant les équations de conservation à une collision binaire élastique des particules de masses m et m' , l'énergie cinétique d'échange est donnée par :

$$\Delta E_c = \frac{2mm'}{(m+m')^2} \quad (1.5)$$

Ce résultat implique que pour des particules de masse identiques ($m = m'$), $E_c = \left(\frac{1}{2}\right)$, et donc toute déformation de la distribution de Maxwell-Boltzmann des particules de masses identiques sera éliminée à dix collisions. Ce qui nous permet de dire que pour les plasmas où les collisions dominent, les particules lourdes et les électrons obéissent à la distribution de Maxwell-Boltzmann, qui permet de définir la température propre de chaque particule. Si l'indice

r désigne les différentes espèces telle que, les électrons les ions et les particules neutres dans le plasma, la distribution de Maxwell-Boltzmann pour chacune des particules peut être écrite en fonction de leurs énergies $E_r = \frac{1}{2}mv_r^2$ comme suit :

$$dn_{Er} = \frac{2n_r}{\sqrt{\pi}}(kT_r)^{-(3/2)} \exp\left(-\frac{E_r}{kT_r}\right) dE_r \quad (1.6)$$

avec T_r : la température de la composante r .

Ces composantes, peuvent elles avoir la même température ?

Lors des collisions élastiques entre deux espèces, les échanges d'énergie cinétique sont proportionnels au rapport des masses des deux espèces et à la fréquence de collision. Un état d'équilibre est alors rapidement atteint si les masses sont voisines. Dans le cas du plasma, les électrons qui ont une masse nettement inférieure à celle des particules lourdes, accélérés par le champ électrique, vont leur transférer une part de leurs d'énergie cinétique.

Considérant l'énergie d'échange entre électrons et espèces lourdes. Avec $m' = m_e$ et $m = m_h$. m_e et m_h sont les masses de l'électron et de l'espèce lourde respectivement. Dans ce cas on a $m_e \ll m_h$ d'où :

$$\Delta E_c = \frac{2m_e}{m_h} \quad (1.7)$$

Donc un grand nombre de collision ($> 10^3$) sont nécessaire pour éliminer cette différence d'énergie. L'énergie transmise par les électrons aux espèces lourdes dans une collision est donnée par la relation suivante :

$$\frac{3}{2}k(T_e - T_h) \frac{2m_e}{m_h} \quad (1.8)$$

T_e et T_h sont les températures des électrons et des espèces lourdes respectivement. Entre deux collisions les électrons seront accélérés par le champs électrique \vec{E} . L'énergie d'un seul électron est donnée par :

$$eE\overline{v_d}\tau_e \quad (1.9)$$

v_d : la vitesse moyenne de dérive.

τ_e : le temps libre moyen des électrons.

avec :

$$\tau_e = \frac{\ell_e}{v_e} \quad (1.10)$$

où :

$$\bar{v}_e = \sqrt{\frac{8kT_e}{\pi m_e}} \quad (1.11)$$

ℓ_e est le libre parcours moyen des électrons.

Pour un état stable on aura :

$$\frac{T_e - T_h}{T_e} = \frac{3\pi m_h}{32m_e} \left(\frac{e\ell_e E}{\frac{3}{2}kT_e} \right)^2 \quad (1.12)$$

Selon l'équation (1.12), l'équilibre ($T_e = T_h$) est atteint lorsque l'énergie que gagnent les électrons entre les collisions est petite devant l'énergie cinétique moyenne des électrons [13]. Une autre interprétation de l'équation (1.12) considère le fait que $\ell_e \sim \frac{1}{P}$, (P est la pression), est par conséquent :

$$\frac{T_e - T_h}{T_e} = \frac{\Delta T}{T_e} \sim \left(\frac{E}{P} \right)^2 \quad (1.13)$$

La relation (1.13) montre que le paramètre $\frac{E}{P}$ joue le rôle le plus important pour déterminer une situation d'équilibre cinétique dans le plasma. Pour des petites valeurs de $\frac{E}{P}$, la température des électrons approche de celle des particules lourdes. C'est l'une des conditions de basse pour avoir un équilibre thermodynamique local (ETL) dans le plasma. D'autres conditions sont nécessaires pour que cet équilibre soit établi, l'équilibre chimique et d'excitation à l'intérieur du plasma et les gradients doivent être faibles. [13]

1.4 Différents types de plasmas

Les plasmas peuvent exister à l'état naturel, comme il peuvent être créés en laboratoire.

1.4.1 Plasmas naturels

Comme indiqué auparavant, 99% de notre univers est à l'état plasma. On peut citer [15] :

- les étoiles, nébuleuses gazeuse,
- les aurores boréales,
- les éclairs,
- le vent solaire.

1.4.2 Plasmas artificiels

C'est la recherche spatiale qui a donné une importante impulsion à la recherche sur les plasmas. C'est en observant les flux de plasmas circulant entre les galaxies qu'on a voulu en créer artificiellement. On peut les trouver dans [15] :

- les téléviseurs,
- les plasmas de traitement (dépôt, gravure, modification de surface ou dopage par implantation ionique),
- la propulsion par plasmas,
- les décharges : comme dans un disjoncteur à haute-tension, ou tube à décharges
- (Lampes, écrans, torche de découpe, production de rayon X),
- et de nombreuses autres applications dont certaines restent encore au stade d'expériences aux laboratoires.

Les plasmas peuvent en fait être classés en fonction de leur densité, de leur température et leur degré d'ionisation on peut citer [15] :

- Les plasmas chauds :

On appelle plasmas chauds les gaz très chauds (1 million de degrés), totalement ionisés, donc formés uniquement d'ions et d'électrons. Les ions positifs ne peuvent s'y recombinaer avec des électrons pour former des atomes neutres. Ce n'est en revanche pas le cas dans les gaz moins chauds, où ces réactions peuvent conduire à la substance d'espèces non ionisées.

- Les plasmas froids

Un plasma froid est souvent hors équilibre thermodynamique, dont la température est un peu plus élevée que la température ambiante allant jusqu'à quelque centaine de degrés, rempli d'électrons chauds à $11600 - 116000K$. Son degré d'ionisation est inférieur à 10^{-2} [19].

Cependant, il existe des plasmas intermédiaires, tels que les plasmas thermiques.

1.5 Plasmas thermiques et appareils de coupure

Les plasmas thermiques générés en laboratoire sont apparus dans les années soixante, tant pour les plasmas d'arc que pour les plasmas radiofréquences. D'une manière générale un plasma thermique existe, dès que son degré d'ionisation est supérieur à environ 10^{-2} . Les plasmas thermiques apparaissent sous forme d'arcs électriques et de décharges Radio Fréquence. La caractéristique essentielle des plasmas thermiques est qu'ils peuvent être générés à pression atmosphérique ou à son voisinage, c'est-à-dire 10^4 et $10^6 Pa$. Leurs densités électroniques sont comprises entre 10^{20} et 10^{24} et des températures entre 5000 et $25000K$ [17].

1.5.1 Arc électrique et plasmas thermiques

Plusieurs définitions ont été données à propos de l'arc électrique, la plus répandue est la suivante "C'est une décharge à forte densité de courant".

Les arcs électriques et les plasmas thermiques ont des applications très variées dans des domaines tels que :

- l'espace (propulseurs),
- les lampes à décharges,
- la projection par plasma d'arcs,
- la soudure,
- la protection contre la foudre,
- la détection par torche ICP,
- les dispositifs de coupure : fusibles, sectionneurs, contacteurs, disjoncteurs. Ces derniers font l'objet de notre étude.

On distingue essentiellement deux type d'arc électrique :

- **Arc de coupure** : des dispositifs de coupure ou de protection contre la foudre ont pour but de limiter l'arc et notamment sont intensité pendant un éventuel court-circuit.
 - **Arc maintenu** : lampes à décharge, projection par plasma, détection par torche ICP, soudure.
- L'arc électrique apparaît dans un mélange gazeux :

- Par claquage diélectrique entre deux électrodes (amorçage par surtension) : au delà d'une certaine valeur de champ électrique fonction de la forme des électrodes, de la nature et de la densité du gaz.
- Dès l'ouverture d'un circuit parcouru par un courant (amorçage par surtension) : au delà d'une certaine valeur

On présente sur la figure (1.1) les différents phénomènes qui règnent dans l'arc.

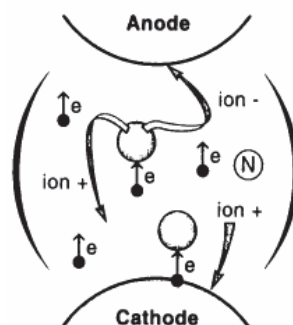


FIG. 1.1 – Phénomène dans l'arc

Le phénomène d'émission des électrons étant par nature énergétique, la cathode sera chaude. Le

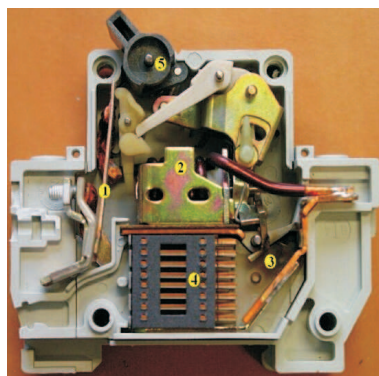
pied d'arc devenant ainsi thermoémissif, les électrons sont majoritairement émis au point chaud, d'où un phénomène de stagnation de l'arc pouvant créer des vapeurs métallique. Ces vapeurs et le gaz ambiant vont alors être ionisés d'où :

- surplus d'électron libre,
- créations d'ion positifs qui retombent sur la cathode et entretiennent sont échauffement,
- créations d'ion négatifs qui bombarde l'anode provoquent son échauffement.

1.5.2 Appareils de coupure ou disjoncteurs

Le disjoncteur est un appareil électromagnétique capable d'établir, de supporter d'interrompre des courants dans des conditions normales, mais surtout dans celles dites "anormales", c'est à dire : surcharge ou court-circuit. Il s'ouvre alors automatiquement. Après élimination du défaut, il suffit de le réarmer par une action manuelle sur la manette. La figure 1.2 présente l'enceinte de coupure d'un disjoncteur basse tension.

Initialement le circuit électrique est fermé, et le courant circule par les bornes supérieures et inférieures à travers les contacts . L'un des contacts est fixe et l'autre est mobile. Dès l'ouverture du circuit, un arc électrique s'établit entre les contacts. Un plasma se forme rapidement par la vaporisation du métal des contacts jouant un rôle d'électrodes, par la rupture diélectrique du gaz de remplissage et par la dissociation et ionisation des molécules du gaz.



- ① : Bilame métallique
- ② : Electroaimant
- ③ : Contacts
- ④ : Chambre de coupure
- ⑤ : Interrupteur

FIG. 1.2 – Enceinte de coupure d'un disjoncteur Basse Tension

Une fois la colonne de plasma établie, l'arc se déplace sur les rails en cuivre disposés entre les contacts et la chambre de coupure. Cette zone est aussi appelée préchambre de coupure et l'une de ses fonctions est d'aider à canaliser l'arc vers la chambre de coupure. Elle permet également l'absorption d'une partie de l'énergie dissipée par l'arc électrique. Deux phénomènes se produisent dans cette région, d'une part un phénomène de convection provoqué par un gradient de pression qui permet l'expulsion du gaz vers l'extérieur par l'échappement en fond de boîtier, d'autre part l'interaction de l'arc avec les parois qui provoque l'érosion de l'enveloppe plastique du disjoncteur. Les matériaux plastiques vont être vaporisés et vont ainsi se mêler à la colonne de plasma. Ces séparateurs ont été positionnés en fond du boîtier. Leur rôle est de sectionner

l'arc, de le refroidir et d'absorber l'énergie dissipée par l'arc électrique, contribuant ainsi au rétablissement diélectrique du gaz jusqu'à la complète extinction de l'arc. L'ablation, par un arc électrique, des parois du boîtier d'un dispositif de coupure entraîne la vaporisation de celles-ci dans la décharge. La présence de ces vapeurs modifie sensiblement les propriétés du plasma de la colonne d'arc.

1.6 Propriétés thermodynamiques et coefficients de transport

L'évaluation des propriétés d'équilibre thermodynamique suppose au préalable la connaissance de la composition chimique du système envisagé. Cette estimation est en général obtenue sur le critère du minimum d'enthalpie libre du système[18].

1.6.1 Composition chimique

La composition chimique d'un mélange est la concentration de chaque espèce, elle désigne la proportion de chaque que composant dans le mélange. On peut parler de :

- Composition qualitative lorsque l'on se contente simplement d'identifier les composants. Par exemple, l'air est essentiellement composé de diazote et de dioxygène.
- Composition quantitative lorsqu'on leur adjoint les concentrations, les quantités. Par exemple, l'air contient environ 78% de diazote et 21% de dioxygène en volume. La composition quantitative peut refléter la proportion volumique ou massique, qui dépendent de la densité de chaque composant. Elle peut être définie par les fractions molaires du mélange ou le pourcentage molaire.

La fraction molaire x_i d'une espèce i est égale au rapport du nombre de molécules de cette espèce n_i sur le nombre total de molécules du mélange n_{tot} . Elle est donc une grandeur sans dimensions.

$$x_i = \frac{n_i}{n_{tot}} \quad (1.14)$$

Ce qui donne en pourcentage :

$$x_i = \frac{n_i}{n_{tot}} \cdot 100 \quad (1.15)$$

1.6.2 Coefficients de transport

Les coefficients de transport telles que la viscosité, la conductibilité électrique et thermiques, la diffusion sont des données de bases pour la modélisation des systèmes à l'état liquide ou gazeux (dynamique des fluides) et apportent une aide précieuse à l'interprétation des résultats expérimentaux.

Viscosité

Considérons un gaz (parfait ou non), contenu entre deux plans **A** et **B** parallèles de dimensions infinies, dont l'un se déplace par rapport à l'autre à la vitesse \vec{v}_B (figure 1.3.a). L'expérience montre [19] :

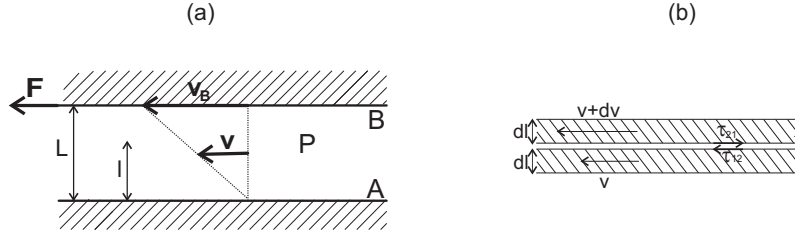


FIG. 1.3 – Mise en évidence de la viscosité

- Pour que **B** se déplace à vitesse constante, il faut exercer une force \vec{F} de traction, ce qui en contrepartie montre que le gaz exerce sur **B** une force $-\vec{F}$.
- En régime permanent, dans le plan P situé à la distance l de A, le gaz a une vitesse d'ensemble :

$$\vec{v} = \left(\frac{l}{L} \right) \vec{v}_B. \quad (1.16)$$

Quel que soit l . Il existe donc un gradient de vitesse constant qui est la preuve d'une interaction de cisaillement entre les plans parallèles à **A**, **B** ou P infiniment voisins :

$$\frac{d\vec{v}}{dl} = \frac{\vec{v}_B}{L} \quad (1.17)$$

Si on considère deux éléments de gaz, d'épaisseur dl , au contact l'un de l'autre figure (1.3.b) (pour la clarté du dessin, ils sont séparés sur la figure). L'un se déplacera à la vitesse \vec{v} , et l'autre à la vitesse $\vec{v} + d\vec{v}$. Cette différence de vitesse ne peut pas apparaître que si une force permet l'accélération ou au contraire la décélération. Ceci se traduit par des contraintes entre les deux éléments. L'élément 1 exerce sur 2 une contrainte $\vec{\tau}_{12}$ dans le sens du mouvement (il tend à accélérer 2), alors que l'élément 2 exerce sur 1 une contrainte inverse $\vec{\tau}_{21}$ (il tend à ralentir 1).

L'expérience montre que cette contrainte s'exprime en fonction du gradient de la vitesse :

$$\tau = \eta \frac{\partial v}{\partial l} \quad (1.18)$$

L'équation (1.16) est la loi de Newton, dans laquelle le coefficient de proportionnalité η est par définition le coefficient de viscosité dynamique, ou simplement la viscosité dynamique du gaz.

Le phénomène de viscosité trouve son origine dans l'agitation thermique des molécules. Au mouvement de l'ensemble qui produit l'écoulement, caractérisé à l'échelle macroscopique par la

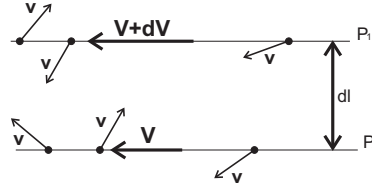


FIG. 1.4 – Viscosité dynamique

vitesse \vec{V} , se superpose le mouvement désordonné de chaque molécule, caractérisé par la vitesse \vec{v} .

Considérons deux plans parallèles et distants de dl figure (1.4). A un instant t , un certain nombre de molécules situé dans le plan P_1 , qui se dirigent vers le plan P_2 , entrèrent en collision avec d'autres molécules de ce plan, et inversement, du plan P_2 vers le plan P_1 .

Comme aux vitesses d'agitation thermique anisotrope, se superposent les vitesses du mouvement d'ensemble qui diffèrent pour P_1 et P_2 , il apparaît le phénomène suivant.

Les molécules provenant de P_1 d'une vitesse d'ensemble $\vec{V} + d\vec{V}$ doivent céder une partie de leur quantité de mouvement afin d'acquérir la vitesse d'ensemble \vec{V} , caractérisant le plan P_2 .

Inversement, les molécules provenant du plan P_2 doivent augmenter leur quantité de mouvement.

Il y a en définitive échange de quantité de mouvement entre les molécules des plans P_1 et P_2 . Cet échange se traduit globalement par une interaction entre les plans moléculaires P_1 et P_2 .

Le plan P_2 exerce, par unité de surface sur le plan P_1 une force τ_{21} telle que :

$$\vec{\tau}_{21} = - \sum m d\vec{v} \quad (1.19)$$

La somme se fait sur toutes les molécules qui quittent P_2 et atteignent l'unité de surface de P_1 . Inversement, P_1 exerce sur P_2 une contrainte accélératrice τ_{12} telle que :

$$\vec{\tau}_{12} = \sum m d\vec{v} \quad (1.20)$$

Expression du coefficient de viscosité

Le raisonnement ci-dessous n'est qu'approchée mais permet néanmoins d'obtenir pour η une valeur proche des valeurs expérimentales.

Considérons non plus une distance quelconque entre les plans P_1 et P_2 , mais une distance égale au libre parcours moyen ℓ . La variation de la vitesse globale est donnée par :

$$\Delta V = \frac{\partial V}{\partial \ell} \ell \quad (1.21)$$

et la variation de la quantité de mouvement d'une molécule de masse m est :

$$\Delta p = m\ell \frac{\partial V}{\partial \ell} \quad (1.22)$$

Le nombre de molécules heurtant l'unité de surface dans l'unité de temps est donné par :

$$g = n \frac{\bar{v}}{4} \quad (1.23)$$

Ainsi, le nombre de molécules se déplaçant de P_1 vers P_2 pendant l'unité de temps sera égal à g . On a donc :

$$\tau_{12} = \sum m dv = \sum \Delta p = g \left(m\ell \frac{\partial V}{\partial \ell} \right) \quad (1.24)$$

d'après les équations (1.24) et (1.18), on en déduit l'expression de η :

$$\eta = g(m\ell) = \frac{n\bar{v}}{4} m\ell \quad (1.25)$$

En utilisant (1.4) et (1.25), on obtient une expression de la viscosité qui ne dépend que de la température :

$$\eta = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{4km}{\pi}} \sqrt{T} \quad (1.26)$$

Qui montre que la viscosité d'un gaz parfait est proportionnelle à la racine carrée de la température.

La dépendance de η avec \sqrt{T} est vérifiée expérimentalement.

Conductivité thermique

Soit un gaz entre deux parois planes parallèles A et B aux températures uniformes T_A , avec par exemple $T_A < T_B$. Les deux plans étant distant de H voir la figure (1.5).

l'expérience montre l'établissement d'un gradient de température constant entre les deux plans :

$$\frac{\partial T}{\partial \ell} = \frac{\Delta T}{H} \quad (1.27)$$

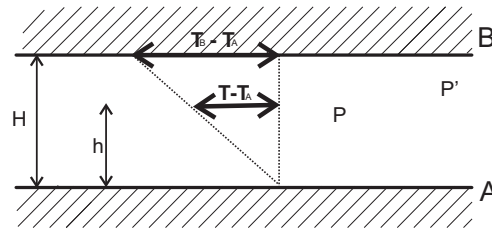


FIG. 1.5 – Mise en évidence de la conductivité thermique

Un flux de chaleur j_Q traverse l'unité de surface du plan P. Ce flux de chaleur est proportionnel au gradient de température. C'est la loi de Fourier qui s'exprime par :

$$j_Q = \lambda \frac{\partial T}{\partial \ell} \quad (1.28)$$

où le coefficient de proportionnalité λ est le coefficient de conductibilité thermique ou plus simplement la conductivité thermique du gaz.

Expression du coefficient de conductibilité thermique

Un flux de chaleur correspond à un flux d'énergie. L'énergie interne du gaz parfait n'étant fonction que de la température, les molécules du plan P à la température T ont une énergie interne U différente de celles des molécules situées au niveau du plan P' dont la température est $T + dT$ et l'énergie interne $U' = U + dU$. Or,

$$dU = \frac{C_v}{N_A} dT \quad (1.29)$$

avec

C_v : capacité calorifique molaire à volume constant,
 N_A : nombre d'Avogadro.

Du fait de l'agitation thermique, il y a entre les plans parallèles voisins des transferts d'énergie (ou de chaleur). Les molécules partant de P vers P' y apportent moins d'énergie que la quantité cédée par les molécules P' à P. Le flux d'énergie a donc lieu globalement de B vers A.

La cause des transferts de quantité de mouvement et d'énergie étant la même, le calcul du flux de chaleur est établie selon le même modèle que le calcul du flux de la quantité de mouvement du paragraphe précédent : la variation de l'énergie interne d'une molécule s'écrit alors :

$$\Delta U = \frac{C_v}{N_A} \frac{\partial T}{\partial \ell} \ell \quad (1.30)$$

Se substituera simplement à la variation de la quantité de mouvement donnée par 1.17, on obtient alors :

$$\lambda = 0.499 n \bar{v} \frac{C_v}{N_A} \ell \quad (1.31)$$

Diffusion d'un gaz

La figure 1.6 représente une enceinte contenant du mercure surmonté d'un gaz à la pression atmosphérique. Ce récipient est fermé en sa partie supérieure par une feuille d'or, de sorte que les molécules de mercure qui heurtent cette feuille y soient absorbées pour former un amalgame. A température ambiante, le mercure a une pression de vapeur saturante P'_0 faible, ce qui entraîne une pression partielle de mercure faible dans le mélange gazeux. En état stationnaire, on constate que :

1. la densité n' des molécules dépend de l'éloignement h du plan P de l'interface liquide/gaz :

$$\begin{cases} h = H, & n' = 0; \\ h = 0, & n' = n'_0 = \frac{P'_0}{KT}. \end{cases} \quad (1.32)$$

2. un flux de vapeur de mercure orienté du bas vers le haut apparaît. Ceci est mis en évidence par la formation de l'amalgame sur la feuille d'or. La vitesse de diffusion du mercure peut en outre être mesurée par l'augmentation de la masse de cette feuille au cours du temps. La première observation implique l'existence d'un gradient de densité (ou de concentration $C = \frac{n'}{n}$), dans la phase gazeuse. l'expérience montre que ce gradient est constant :

$$\frac{\partial n'}{\partial h} = \frac{n'_0}{H} \quad (1.33)$$

La mesure du flux de vapeur montre que ce flux est proportionnel au gradient de densité moléculaire :

$$j_m = D \frac{\partial n'}{\partial h} \quad (1.34)$$

l'équation (1.34) exprime la première loi de Fick, dans laquelle j_m est le nombre de molécules qui traversent l'unité de surface du plan P pendant l'unité de temps. Le facteur de proportionnalité D est le coefficient de diffusion.

Expression du coefficient de diffusion

Le mécanisme qui préside à la diffusion étant le même que celui qui règle les phénomènes de viscosité et de transfert thermique (agitation thermique des molécules), le calcul du coefficient de diffusion est identique au calcul du coefficient de viscosité ou de conductibilité thermique. On

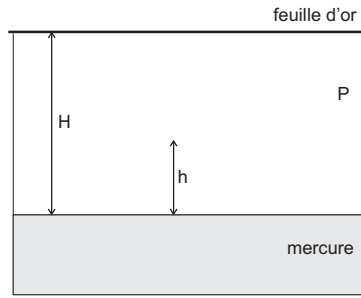


FIG. 1.6 – Mise en évidence du coefficient de diffusion

pourrait d'ailleurs parler dans ces deux dernier cas de diffusion de quantité de mouvement et de diffusion de chaleur. Ici la grandeur transportée est de la matière.

Ainsi, le coefficient de diffusion s'obtient on substituant dans le calcul de la viscosité ou de la conductivité thermique respectivement les grandeurs $m \left(\frac{\partial V}{\partial \ell} \right) \ell$ ou $\left(\frac{C_v}{N_A} \right) \left(\frac{\partial V}{\partial \ell} \right) \ell$ par l'expression $\left(\frac{\partial C}{\partial \ell} \right) \ell = \left(\frac{\ell}{n} \right) \left(\frac{\partial n'}{\partial \ell} \right)$.

L'expression du coefficient de diffusion est alors :

$$D = \alpha \bar{v} \ell = \frac{\alpha}{d^2} \sqrt{\frac{4k^3}{m\pi^3}} \frac{T\sqrt{T}}{p} \quad (1.35)$$

où $\alpha = 0.499$ pour la théorie la plus rigoureuse.

La relation (1.35) montre que le coefficient de diffusion dépend de la température et de la pression.

Conductivité électrique

Un système solide, liquide ou gaz contient des particules chargées qui sont libre de se déplacer. Si un champ électrostatique uniforme $E\vec{e}_z$ est appliqué au système, alors il existe en régime permanent une densité de courant électrique $\vec{j} = j\vec{E}$. Comme $j = 0$ lorsque $E = 0$, on peut écrire, à l'ordre un en E :

$$j = \sigma E \quad (1.36)$$

L'équation (1.36) représente la loi d'Ohm où σ est la conductivité électrique du système.

dans le cas des plasma, les électrons entre en collision avec les molécules neutre et avec les ions, dont on néglige le mouvement en première analyse.

Un champ électrostatique $\vec{E} = E\vec{e}_z$ uniforme est appliqué. Une particule de charge q et de masse m subit une collision à $t = 0$. Ensuite, avant une nouvelle collision, le mouvement suivant l'axe z

de cette particule est fixé par :

$$m \frac{dv_z}{dt} = qE \quad (1.37)$$

D'où :

$$v_z(t) = \frac{qE}{m}t + v_z(0) \quad (1.38)$$

On en déduit :

$$\bar{v}_z = \frac{qE}{m}\tau \quad (1.39)$$

Où τ est le temps libre moyen, puis on a :

$$j = nq\bar{v}_z = \sigma E \quad (1.40)$$

avec :

$$\sigma = \frac{nq^2\tau}{m} \quad (1.41)$$

Cette expression se généralise pour la situation où plusieurs types de particule (charges q_i , masse m_i , densité numérique n_i) sont présentes.

$$\sum_i \frac{n_i q_i^2 \tau_i}{m_i} \quad (1.42)$$

Chapitre 2

Solution de Chapman-Enskog de l'équation de Boltzmann

Le développement rigoureux de la théorie cinétique des gaz est basé sur la connaissance de la fonction de distribution $f_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t)$. Cette fonction représente le nombre de particules de l'espèce i qui, à l'instant t , se trouvent dans un volume unité de l'espace des phases entourant le point (\vec{r}, \vec{v}_i) .

Généralement on a l'habitude de s'intéresser aux propriétés des gaz sous des conditions légèrement différentes de l'équilibre. Dans cette limite la fonction de distribution est proche d'une Maxwellienne, et l'équation de Boltzmann peut être résolue par la méthode de perturbation développée par Chapman et Enskog. Les solutions obtenues sont donc utilisées pour obtenir les expressions des flux et les coefficients de transport [20].

2.1 Fonction de distribution

Considérons un mélange gazeux, et soit $f_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t)$ la fonction de distribution de l'espèce i .

Dans le cas particulier où le système considéré est à l'équilibre, f_i se réduit à une distribution Maxwellienne :

$$f_i^0 = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left(- \frac{m_i V_i^2}{2kT} \right) \quad (2.1)$$

avec :

n_i : densité numérique de l'espèce i ,

m_i : masse de l'espèce i ,

$\vec{V}_i = \vec{v}_i - \vec{v}_0$: vitesse particulière de l'espèce i ,

\vec{v}_0 : vitesse de courant ou de flot. Elle sera définie ultérieurement,

k : constante de Boltzmann,

T : température absolue.

Dans le cas de non équilibre, cette fonction inconnue f_i vérifie l'équation integro-différentielle de Boltzmann donnée comme suit [20] :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \left(\vec{v}_i \frac{\partial f_i}{\partial \vec{r}} \right) + \frac{1}{m_i} \left(\vec{X}_i \frac{\partial f_i}{\partial \vec{v}_i} \right) = \sum_j \int \int \int (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} b db d\epsilon d\vec{v}_j \quad (2.2)$$

\vec{X}_i représentent la force totale (due à un champs externe) agissant sur la particule i et t le temps.
 $g_{ij} = g_{ji} = |\vec{g}_{ij}|$ avec \vec{g}_{ij} vitesse relative initial de la particule j par rapport à la particule i ,
 soit $\vec{g}_{ij} = \vec{v}_j - \vec{v}_i$

b : le paramètre d'impact.

ϵ : le paramètre angulaire.

L'intégral $J_j = \int \int \int (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} b db d\epsilon d\vec{v}_j$ représente la variation totale du nombre de particule i dans l'état (\vec{r}, \vec{v}_i) sous l'effet des collisions (supposées élastiques), pendant l'unité de temps, avec les particules de l'espèce j . On l'appel intégrale de collision.

f'_i et f'_j sont les valeur de f_i et f_j après la collision [21].

Les hypothèses sous lesquelles l'équation de Boltzmann est valable sont :

1. Les interactions sont seulement binaires.
2. La portée des interaction est faible.
3. les vitesses en dehors de la sphère d'interaction sont réparties au hasard.
4. Les fonctions de distribution varient peu pendant une rencontre.

Remarque :

On peut vérifier que la fonction de distribution de Maxwell f_i^0 est une solution particulière simple de l'équation de Boltzmann (Solution indépendante de la position et du temps) [22].

2.2 Vitesses moléculaires

La valeur moyenne d'une fonction de la vitesse, par exemple $\alpha(\vec{v}_j)$ est défini comme suit[20] :

$$\bar{\alpha}(\vec{r}, t) = \frac{1}{n_j} \int \alpha(\vec{v}_j) f_j(\vec{r}, \vec{v}_j, t) d\vec{v}_j \quad (2.3)$$

avec n_j la densité numérique de l'espèce j

2.2.1 Vitesse moyenne de masse

Elle est définie par :

$$v_0(\vec{r}, t) = \frac{1}{\rho} \sum_j n_j m_j \overline{v_j} \quad (2.4)$$

avec ρ est la densité totale du gaz en un point particulier :

$$\rho(\vec{r}, t) = \sum_j n_j m_j \quad (2.5)$$

2.2.2 Vitesse particulière de l'espèce j

Elle est définie comme la vitesse de la molécule par rapport à un axe en mouvement avec une vitesse \vec{v}_0 , elle est dite parfois vitesse d'agitation [21] :

$$\vec{V}_j = \vec{v}_j - \vec{v}_0 \quad (2.6)$$

On déduit la vitesse de diffusion :

$$\overline{\vec{V}_j} = \frac{1}{n_j} \int (\vec{v}_j - \vec{v}_0) f_j(\vec{r}, \vec{v}_j, t) d\vec{v}_j \quad (2.7)$$

D'autres types de vitesses peuvent être définis :

2.2.3 Vitesse réduite

$$\vec{W}_j = \sqrt{\frac{m_j}{2kT}} \vec{v}_j \quad (2.8)$$

2.2.4 Vitesse initiale réduite

$$\vec{\gamma}_{ij} = \sqrt{\frac{\mu_{ij}}{2kT}} \vec{g}_{ij} \quad (2.9)$$

avec μ_{ij} est la masse réduite de deux particules en collision : $\frac{1}{\mu_{ij}} = \frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_j}$

La température T étant défini par :

$$\frac{3}{2}kT = \frac{1}{n} \sum_j n_j \left(\frac{1}{2} m_j \overline{V_j^2} \right) \quad (2.10)$$

Remarque importante :

Il faut noter, dans le calcul des quantités moyennes, que l'intégration par rapport à \vec{V}_j est équivalent à l'intégration par rapport à \vec{v}_j puisque ces deux vitesses diffèrent d'une constante et que l'intégration est étendue à l'espace des vitesses tout entier [21].

2.3 Vecteur flux

Dans un gaz sous les conditions de non-équilibre, les gradients d'une ou de plusieurs quantités physiques macroscopiques du système (composition, vitesse moyenne de masse, et température) sont les causes du transport moléculaire de masse m_j , de quantité de mouvement $m_j \vec{V}_j$, et d'énergie cinétique $\frac{1}{2} m_j V_j^2$ à travers le gaz.

Comme le mécanisme de transport de chacune de ces grandeurs peut être traité d'une façon similaire, elles sont désignées d'une façon collective par Ψ_j [20].

Nous allons maintenant examiner le transport de ces grandeurs Ψ_j à l'échelle microscopique.

Considérons un élément de surface dS à l'intérieur du gaz, qui se déplace avec une vitesse moyenne de masse \vec{v}_0 , son orientation est donnée par le vecteur unitaire \vec{n} normal à la surface figure (2.1).

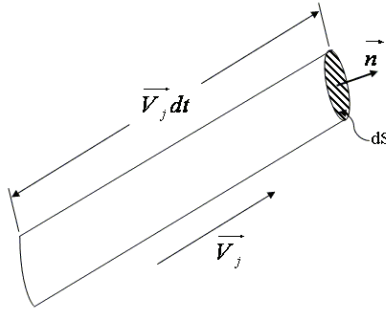


FIG. 2.1 – Le cylindre contenant toutes les molécules d'espèce j de vitesses V_j , qui traversent la surface pendant l'intervalle de temps dt [20].

La vitesse des molécules du $j^{\text{ème}}$ espèce par rapport à la surface dS est \vec{V}_j . Comme il y a $f_j d\vec{V}_j$ molécules par unité de volume qui ont une vitesse \vec{V}_j , le nombre de molécules qui traversent dS durant un temps dt est :

$$f_j(\vec{n} \cdot \vec{V}_j) d\vec{V}_j dS dt \quad (2.11)$$

Si on associe à chaque molécule la propriété Ψ_j , dont l'amplitude dépend de la vitesse \vec{V}_j , alors :

$$\Psi_j f_j(\vec{n} \cdot \vec{V}_j) d\vec{V}_j dS dt \quad (2.12)$$

est la quantité de cette grandeur transportée à travers dS durant l'intervalle de temps dt par les molécules qui ont des vitesses dans l'intervalle de vitesse $[\vec{V}_j, \vec{V}_j + d\vec{V}_j]$. son flux est donc donné par :

$$\Psi_j f_j \vec{n} \vec{V}_j d\vec{V}_j \quad (2.13)$$

En integrant l'équation (2.13), on retrouve le flux total.

$$\int \Psi_j f_j \vec{n} \vec{V}_j d\vec{V}_j = \vec{n} \int \Psi_j f_j \vec{V}_j d\vec{V}_j \equiv \vec{n} \vec{\Psi}_j \quad (2.14)$$

Le vecteur

$$\vec{\Psi}_j = \int \Psi_j f_j \vec{V}_j d\vec{V}_j \quad (2.15)$$

est appelé le vecteur flux associé à la grandeur Ψ_j , on définit alors :

2.3.1 Flux de masse

Si $\Psi_j = m_j$, alors :

$$\vec{\Psi}_j = m_j \int f_j \vec{V}_j d\vec{V}_j = n_j m_j \vec{V}_j = \vec{j}_j \quad (2.16)$$

est le vecteur flux de masse.

2.3.2 Flux de quantité de mouvement

Si $\Psi_j = m_j V_{jx}$, alors :

$$\vec{\Psi}_j = m_j \int V_{jx} \vec{V}_j f_j d\vec{V}_j = n_j m_j \overline{V_{jx} \vec{V}_j} \quad (2.17)$$

est le vecteur flux associé au transport de la composante de la quantité de mouvement suivant l'axe des x, ses composantes sont $(p_j)_{xx}$, $(p_j)_{xy}$, $(p_j)_{xz}$, leurs valeurs sont donnés par $(n_j m_j \overline{V_{jx} V_{jx}})$, $(n_j m_j \overline{V_{jx} V_{jy}})$, $(n_j m_j \overline{V_{jx} V_{jz}})$ respectivement.

On peut ainsi définir deux autres vecteurs flux en prenant successivement $\Psi_j = m_j V_{jy}$ et $\Psi_j = m_j V_{jz}$.

Les neuf composantes de ces trois vecteurs définissent un tenseur du second ordre, noté symboliquement par [21] :

$$\overleftrightarrow{p}_j = n_j m_j \overline{\vec{V}_j \vec{V}_j} \quad (2.18)$$

$\overleftrightarrow{V}_j \vec{V}_j$ peut être représenté par la matrice : $\begin{pmatrix} \overline{V_{jx} V_{jx}} & \overline{V_{jx} V_{jy}} & \overline{V_{jx} V_{jz}} \\ \overline{V_{jy} V_{jx}} & \overline{V_{jy} V_{jy}} & \overline{V_{jy} V_{jz}} \\ \overline{V_{jz} V_{jx}} & \overline{V_{jz} V_{jy}} & \overline{V_{jz} V_{jz}} \end{pmatrix}$

Cette matrice est symétrique, car les vecteurs qui la définissent sont identiques.

$\overleftarrow{p} = \sum_j \overleftarrow{p}_j$ s'appelle le tenseur des pressions.

Dans le cas particulier de l'équilibre $f_j = f_j^0$ les intégrales donnant les éléments non diagonaux

s'annulent, \overleftarrow{p} devient sphérique et s'écrit [21] : $\overleftarrow{p} = p \overleftarrow{U}$ avec $\overleftarrow{U} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$

2.3.3 Flux d'énergie cinétique

Si $\Psi_j = \frac{1}{2}m_j V_j^2$, alors

$$\overrightarrow{\Psi}_j = \frac{1}{2}m_j \int V_j^2 \overrightarrow{V}_j f_j d\overrightarrow{V}_j = \frac{1}{2}n_j m_j \overline{V_j^2 \overrightarrow{V}_j} = \overrightarrow{q}_j \quad (2.19)$$

La somme de tels vecteurs sur toutes les espèces du gaz donne ce qu'on appelle le vecteur flux de chaleur [20] :

$$\overrightarrow{q} = \sum_j \frac{1}{2}n_j m_j \overline{V_j^2 \overrightarrow{V}_j} \quad (2.20)$$

Les composantes q_x , q_y et q_z de ce vecteur représentent le flux de l'énergie cinétique dans les directions x, y et z respectivement.

2.4 Equations de transfert

Elles sont établies directement à partir de l'équation de Boltzmann sans qu'il soit nécessaire de déterminer réellement la forme de la fonction de distribution f_i [20].

En multipliant les deux membres l'équation de Boltzmann par la quantité Ψ_i associée à la $i^{\text{ème}}$ espèce et en intégrant par rapport à \overrightarrow{v}_i on obtient :

$$\int \Psi_i \left\{ \frac{\partial f_i}{\partial t} + \left(\overrightarrow{v}_i \frac{\partial f_i}{\partial \overrightarrow{r}} \right) + \frac{1}{m_i} \left(\overrightarrow{X}_i \frac{\partial f_i}{\partial \overrightarrow{v}_i} \right) \right\} d\overrightarrow{v}_i \quad (2.21)$$

$$= \sum_j \int \int \int \int \Psi_i (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} b db d\varepsilon d\overrightarrow{v}_i d\overrightarrow{v}_j$$

Après quelques opérations [20], on obtient l'équation générale de transfert d'Enskog pour la quantité Ψ_i associée à la $i^{\text{ème}}$ espèce :

$$\frac{\partial(n_i \overline{\Psi}_i)}{\partial t} + \left(\overrightarrow{\frac{\partial}{\partial \overrightarrow{r}}} n_i \overline{\Psi}_i \overrightarrow{v}_i \right) - n_i \left\{ \frac{\partial \overline{\Psi}_i}{\partial t} + \left(\overrightarrow{v}_i \frac{\partial \overline{\Psi}_i}{\partial \overrightarrow{r}} \right) + \left(\frac{\overrightarrow{X}_i}{m_i} \frac{\partial \overline{\Psi}_i}{\partial \overrightarrow{v}_i} \right) \right\} \quad (2.22)$$

$$= \sum_j \int \int \int \int \Psi_i (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} b db d\varepsilon d\overrightarrow{v}_i d\overrightarrow{v}_j$$

L'équation (2.22) est l'équation de transfert d'Enskog de la quantité Ψ_i associée à la $i^{\text{ème}}$ espèce.

On peut étendre l'équation de transfert de la propriété Ψ au gaz tout entier en sommant par rapport à i les deux membre de l'équation d'Enskog. En symétrisant le second membre de l'équation ainsi obtenue, on peut lui donner la forme [20].

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} \int \int \int \int \Psi_i (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} b db d\varepsilon d\vec{v}_i d\vec{v}_j \\ = \frac{1}{4} \sum_{i,j} \int \int \int \int (\Psi_i + \Psi_j - \Psi'_i - \Psi'_j) (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} b db d\varepsilon d\vec{v}_i d\vec{v}_j \end{aligned} \quad (2.23)$$

Ψ'_i et Ψ'_j sont les valeurs de Ψ_i et Ψ_j après la collision. Pour les quantités Ψ_i et Ψ_j invariables au cours d'une rencontre telles que m_i , $m_i \vec{V}_i$ et $\frac{1}{2} m_i V_i^2$, ce second membre s'annule et dans ce cas on les appelle les "invariants sommatoires".

2.4.1 Expressions explicites des equations de transfert

On peut utiliser les équations de transfert pour chaque grandeur que peut prendre Ψ_i .

1. Si $\Psi_i = m_i$ L'équation de transfert (2.22) devient :

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \left(\frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}} \cdot n_i \vec{v}_i \right) = 0 \quad (2.24)$$

Si on remplace \vec{v}_i par son expression donnée par (2.6), l'équation (2.24) devient :

$$\frac{\partial n_i}{\partial t} + \left(\frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}} \cdot n_i (\vec{v}_0 + \vec{V}_i) \right) = 0 \quad (2.25)$$

Ces deux dernières équations représentent deux formes de l'équation de continuité de l'espèce i . En multipliant les deux membres de l'équation (2.25) par m_i et en sommant par rapport à i , tout en tenant compte que $\sum_i n_i m_i \vec{V}_i = 0$, nous obtenons l'équation de continuité pour le gaz dans son ensemble [20] :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left(\frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}} \cdot \rho \vec{v}_0 \right) = 0 \quad (2.26)$$

2. Si $\Psi_i = m_i \vec{V}_i$, l'équation de transfert (2.22) devient (après sommation par rapport à i)

$$\sum_i m_i \left\{ \frac{\partial n_i \vec{V}_i}{\partial t} + \left(\frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}} \cdot n_i \vec{v}_i \vec{V}_i \right) - n_i \frac{\partial \vec{V}_i}{\partial t} - n_i \left(\vec{v}_i \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \cdot \vec{V}_i \right) - \frac{n_i}{m_i} \left(\vec{X}_i \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{v}_i} \vec{V}_i \right) \right\} = 0 \quad (2.27)$$

On peut donner à l'équation (2.30) deux nouvelles formes en utilisant [20] :

- l'équation de continuité, ce qui nous donne :

$$\rho \frac{\partial \widehat{U}^{(tr)}}{\partial t} + \rho u \left(\vec{v}_0 \frac{\partial \widehat{U}^{(tr)}}{\partial \vec{r}} \right) = - \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{q} \right) - \left(\overleftarrow{p} : \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{v}_0 \right) + \sum_i n_i (\overleftarrow{X}_i \overleftarrow{V}_i) \quad (2.32)$$

- Les définitions de $\widehat{U}^{(tr)}$ et de T , ce qui nous donne :

$$\begin{aligned} \frac{3}{2} nk \left[\frac{\partial T}{\partial t} + \left(\vec{v}_0 \frac{\partial T}{\partial \vec{r}} \right) \right] &= - \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{q} \right) - \left(\overleftarrow{p} : \frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{v}_0 \right) + \sum_i n_i (\overleftarrow{X}_i \overleftarrow{V}_i) \\ + \frac{3}{2} kT \left(\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \sum_i n_i \overleftarrow{V}_i \right) & \end{aligned} \quad (2.33)$$

Les équations (2.32) et (2.33) s'appliquent seulement à un mélange sans réactions entre particules et sans degrés internes de liberté. Si on remplace $\widehat{U}^{(tr)}$ par \widehat{U} (énergie interne totale) dans (2.32), l'équation obtenue est valable pour un mélange de molécules polyatomiques, siège de réaction [20].

2.5 Solution d'Enskog de l'équation de Boltzmann

Plusieurs tentatives ont été faites pour obtenir des solutions approchées de l'équation de Boltzmann. Nous citons, parmi les plus importantes, tout d'abord deux méthodes classiques : la méthode de Chapman-Enskog [23] et celle de Grad [24].

Ces deux méthodes sont des méthodes approximations successives, La première consiste à obtenir les fonctions de distributions inconnues à un niveau d'approximation d'ordre un, par contre la deuxième peut s'étendre à des ordres supérieurs et elle s'avère plus puissante pour étudier des systèmes dans des états très éloignés de l'équilibre [20].

2.5.1 Théorème-H (solution d'équilibre)

Les fonctions de distribution décrivant le comportement d'un mélange gazeux sont solution du système d'équations de Boltzmann [20].

Si on suppose que le mélange gazeux est constitué de ν espèces chimiques n'est soumis à aucune force extérieure et sous des conditions uniformes, la variation de la fonction de distribution f_i en fonction du temps est donnée par :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} = \sum_{j=1}^{\nu} \int \int \int (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} b \, db \, d\varepsilon d\vec{v}_j \quad i = 1, 2, \dots, \nu \quad (2.34)$$

On introduit une fonction $H(t)$ définie par :

$$H(t) = \sum_{j=1}^{\nu} \int f_i(\vec{v}_i, t) \ln f_i(\vec{v}_i, t) d\vec{v}_i \quad (2.35)$$

En dérivant $H(t)$ et en utilisant la $i^{\text{ème}}$ équation du système (2.34), on obtient :

$$\frac{dH}{dt} = \sum_{i,j} \int \int \int \int (1 + \ln f_i) (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} b \, db \, d\varepsilon d\vec{v}_i d\vec{v}_j \quad (2.36)$$

Soit après symétrisation [20] :

$$\frac{dH}{dt} = -\frac{1}{4} \sum_{i,j} \int \int \int \int \left(\ln \frac{f'_i f'_j}{f_i f_j} \right) (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} b \, db \, d\varepsilon d\vec{v}_i d\vec{v}_j \quad (2.37)$$

Les formules entre parenthèses sous l'intégral sont de la forme $(x - y) \ln(x/y)$, avec $x = f'_i f'_j$ et $y = f_i f_j$. Si $x > y$, on a $(x - y)$ est positif, $\ln(x/y)$ est positif et si $x < y$, on a $(x - y)$ est négatif, $\ln(x/y)$ est négatif. Par conséquent le produit $(x - y) \ln(x/y)$ est toujours positif ou nul, d'où $\frac{dH}{dt}$ est toujours négatif ou nul, ainsi $H(t)$ ne peut jamais croître [20].

$H(t)$, d'après sa définition, est bornée et tend vers une limite pour les grandes valeurs de t . Donc lorsque la limite est atteinte $\frac{dH}{dt} = 0$, et toute fonction de distribution f_i ($i = 1, 2, \dots, \nu$) doit être telle que l'argument de chacune des intégrales à droite de (2.37) est nul. Autrement dit, à l'équilibre, nous devons avoir $\ln \left(\frac{f'_i f'_j}{f_i f_j} \right) = 0$ soit :

$$\ln f_i + \ln f_j = \ln f'_i + \ln f'_j \quad (2.38)$$

C'est à dire que les logarithme des fonctions de distribution doivent être des invariants additifs.

On peut donc conclure que, à l'équilibre, la forme la plus générale de toute fonction f_i est telle que :

$$\ln f_i = a_i m_i + (\vec{b} \cdot m_i \vec{v}_i) + c_i \left(\frac{1}{2} m_i v_i^2 \right) \quad (2.39)$$

où a_i , \vec{b} et c_i sont des constantes dépendant (par l'intermédiaire des fonctions de distribution initiales) du nombre totale de molécules de l'espèce i , de la quantité de mouvement totale et de l'énergie totale du mélange. En faisant intervenir n_i , \vec{v}_0 et $\vec{V}_i = \vec{v}_i - \vec{v}_0$ on obtient la fonction de

distribution d'équilibre donnée précédemment par la relation (2.1), ce qui nous permet de dire que la distribution est identiquement maxwellienne pour toutes les espèces [23]

A l'équilibre f_i est indépendante du temps, donc $\frac{\partial f_i}{\partial t}$ et les second membre des équations (2.34) doivent être nuls. D'après le théorème-H cela vient du fait que l'argument de toute intégrale figurant dans ces membre est nul, soit :

$$f_i f_j = f'_i f'_j \quad (i = 1, 2, \dots, \nu) \quad (2.40)$$

Autrement dit, à l'équilibre, dans un intervalle de vitesse particulier, le nombre de molécules d'une espèce i perdues par suite de collisions avec des molécules d'une espèce j est exactement égal au nombre de molécules i créés par les collisions inverses [20][21].

2.5.2 Série d'Enskog

Les equations de Boltzmann peuvent être écrites sous la forme [20] :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \left(\vec{v}_i \frac{\partial f_i}{\partial \vec{r}} \right) + \frac{1}{m_i} \left(\vec{X}_i \frac{\partial f_i}{\partial \vec{v}_i} \right) = \sum_j^\nu J(f_i, f_j) \quad (2.41)$$

où $J(f_i, f_j)$ est la forme bilinéaire représentant les integrals de collision.

$$J(f_i, f_j) = \int \int \int (f'_i f'_j - f_i f_j) g_{ij} b \, db \, d\varepsilon \, d\vec{v}_j \quad (2.42)$$

Les series de solutions de l'équation de Boltzmann est obtenue en introduisant un paramètre de perturbation ξ dans cette dernière, ce qui a pour effet de modifier arbitrairement la fréquence de collision sans effectuer le nombre relatif de collision d'une catégorie particulière, donc :

$$\frac{\partial f_i}{\partial t} + \left(\vec{v}_i \frac{\partial f_i}{\partial \vec{r}} \right) + \frac{1}{m_i} \left(\vec{X}_i \frac{\partial f_i}{\partial \vec{v}_i} \right) = \frac{1}{\xi} \sum_j^\nu J(f_i, f_j) \quad (2.43)$$

$\frac{1}{\xi}$ mesure la fréquence des collisions, par conséquent si ξ est petit, les collisions sont très fréquentes et le gaz se comporte comme un milieu continu faiblement écarté de la position d'équilibre local généralisé [20].

Ensuite Enskog a supposé l'existence à priori d'une série en ξ solution de l'équation (2.43), c'est à dire a supposé pour la fonction inconnue f_i l'expression :

$$f_i = f_i^{[0]} + \xi f_i^{[1]} + \xi^2 f_i^{[2]} + \dots + \xi^r f_i^{[r]} + \dots \quad (2.44)$$

$f_i^{[r]}$ est l'approximation d'ordre r .

Le problème consiste à vérifier l'existence de cette solution et en montrant qu'on peut effectivement calculer des $f_i^{[r]}$ répondant à la question.

En reportant la valeur de f_i donnée par la relation (2.44) dans l'équation (2.43) et en identifiant les coefficients des puissances égales de ξ figurant dans les deux membres, nous obtenons un ensemble d'équations pour les fonctions $f_i^{[0]}, f_i^{[1]}, f_i^{[2]}, \dots$:

$$\left\{ \begin{array}{l} 0 = \sum_j J(f_i^{[0]}, f_j^{[0]}) \\ \frac{\partial f_i^{[0]}}{\partial t} + \left(\vec{v}_i \frac{\partial f_i^{[0]}}{\partial \vec{r}} \right) + \frac{1}{m_i} \left(\vec{X}_i \frac{\partial f_i^{[0]}}{\partial \vec{v}_i} \right) = \sum_j [J(f_i^{[0]}, f_j^{[1]}) + J(f_i^{[1]}, f_j^{[0]})] \\ \frac{\partial f_i^{[1]}}{\partial t} + \left(\vec{v}_i \frac{\partial f_i^{[1]}}{\partial \vec{r}} \right) + \frac{1}{m_i} \left(\vec{X}_i \frac{\partial f_i^{[1]}}{\partial \vec{v}_i} \right) = \sum_j [J(f_i^{[0]}, f_j^{[2]}) + J(f_i^{[1]}, f_j^{[1]}) + J(f_i^{[2]}, f_j^{[0]})] \end{array} \right. \quad (2.45)$$

La première équation du système (2.45) est l'ensemble des équations intégrales couplées considérées dans la solution d'équilibre de l'équation de Boltzmann et du théorème-H. La solution la plus générale est :

$$f_i^{[0]} = n_i \left(\frac{m_i}{2\pi KT} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{m_i(\vec{v}_i - \vec{v}_0)^2}{2KT} \right) \quad (2.46)$$

Les quantités $n_i = n_i(\vec{r}, t)$, $\vec{v}_0 = \vec{v}_0(\vec{r}, t)$, $T = T(\vec{r}, t)$, dans la mesure où elles interviennent, sont des fonctions arbitraires de l'espace et du temps. Pour que ces fonctions soient précisément et physiquement la densité numérique, la vitesse moyenne de masse et la température locale, elles doivent vérifier les définitions suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int f_i d\vec{v}_i = n_i \\ \sum_i m_i \int \vec{v}_i f_i d\vec{v}_i = \rho \vec{v}_0 \\ \frac{1}{2} \sum_i m_i \int (\vec{v}_i - \vec{v}_0)^2 f_i d\vec{v}_i = \frac{3}{2} nkT \end{array} \right. \quad (2.47)$$

Par conséquent si nous remplaçons l'expression de f_i donné par (2.44) dans (2.47), nous devons avoir puisque ξ est petit peut particulièrement prendre la valeur zéro :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int f_i^{[0]} d\vec{v}_i = n_i \\ \sum_i m_i \int \vec{v}_i f_i^{[0]} d\vec{v}_i = \rho \vec{v}_0 \\ \frac{1}{2} \sum_i m_i \int (\vec{v}_i - \vec{v}_0)^2 f_i^{[0]} d\vec{v}_i = \frac{3}{2} nKT \end{array} \right. \quad (2.48)$$

et il s'en suit que :

$$\left\{ \begin{array}{l} \int f_i^{[r]} d\vec{v}_i = 0 \\ \sum_i m_i \int \vec{v}_i f_i^{[r]} d\vec{v}_i = 0 \\ \frac{1}{2} \sum_i m_i \int (\vec{v}_i - \vec{v}_0)^2 f_i^{[r]} d\vec{v}_i = 0 \end{array} \right. \quad r = 1, 2, 3, \dots \quad (2.49)$$

On peut montrer que chacune des équations intégrales dans (2.45), jointe aux conditions auxiliaires (2.49) permet de déterminer d'une façon unique un ensemble de fonctions $f_i^{[r]}$ [23]. L'existence de ces fonctions, vérifiant les équations (2.48) justifie la forme supposée d'Enskog que l'on utilise comme solution de l'équation de Boltzmann.

2.5.3 Solution de perturbation d'ordre un

En ne considérant que des états très voisins de l'équilibre, c'est à dire en prenant ξ très petit (ξ^2 négligeable), la série d'Enskog se réduit à :

$$f_i = f_i^{[0]} + \xi f_i^{[1]}. \quad (2.50)$$

Donc la détermination de f_i revient à déterminer $f_i^{[1]}$ [20].

Pour déterminer $f_i^{[1]}$, on pose [23] :

$$f_i^{[1]}(\vec{r}, \vec{v}_i, t) = f_i^{[0]}(\vec{r}, \vec{v}_i, t) \Phi_i(\vec{r}, \vec{v}_i, t) \quad (2.51)$$

où Φ_i est une fonction de perturbation inconnue.

La détermination de $f_i^{[1]}$ se ramène donc au calcul de Φ_i .

En remplaçant la nouvelle expression de $f_i^{[1]}$ donnée par (2.51), la deuxième équation de (2.45) devient :

$$\frac{\partial f_i^{[0]}}{\partial t} + \left(\vec{v}_i \frac{\partial f_i^{[0]}}{\partial \vec{r}} \right) + \frac{1}{m_i} \left(\vec{X}_i \frac{\partial f_i^{[0]}}{\partial \vec{v}_i} \right) = \sum_{j=1}^{\nu} \int \int \int f_i^{[0]} f_j^{[0]} (\Phi'_i + \Phi'_j - \Phi_i - \Phi_j) g_{ij} b db d\varepsilon d\vec{v}_j \quad (2.52)$$

Pour $r = 1$, les équations de la relation (2.49) deviennent :

$$\begin{cases} \int f_i^{[0]} \Phi_i d\vec{v}_i = 0 \\ \sum_i m_i \int \vec{v}_i f_i^{[0]} \Phi_i d\vec{v}_i = 0 \\ \frac{1}{2} \sum_i m_i \int (\vec{v}_i - \vec{v}_0)^2 f_i^{[0]} \Phi_i d\vec{v}_i = 0 \end{cases} \quad (2.53)$$

Le système (2.52) et (2.53), permet de déterminer Φ_i de façon unique [20].

Pour effectuer les calculs indiqués dans le premier membre de l'équation (2.52), il faut procéder de la manière suivante [20][21] :

1. On remplace f_i par $f_i^{[0]}$ dans les expressions des vecteurs flux \vec{j}_i , \vec{q} et du tenseur de pression \overleftarrow{p} , ce qui nous donne $\vec{j}_i = 0$, $\vec{q} = 0$ et $\overleftarrow{p} = p \overleftarrow{U}$ avec $p = nkT$
2. On reporte ces valeurs des vecteurs flux dans les équations de transfert, qui deviennent :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_i}{\partial t} &= -n_i \left(\frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}} \vec{v}_0 \right) - \vec{v}_0 \frac{\vec{\partial} n_i}{\partial \vec{r}} \\ \frac{\partial \vec{v}_0}{\partial t} &= - \left(\vec{v}_0 \frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}} \vec{v}_0 \right) - \vec{v}_0 \frac{1}{\rho} \frac{\vec{\partial} P}{\partial \vec{r}} + \frac{1}{\rho} \sum_i n_j \vec{X}_j \\ \frac{\partial T}{\partial t} &= - \left(\vec{v}_0 \frac{\vec{\partial} T}{\partial \vec{r}} \right) - \frac{2}{3} T \left(\overleftarrow{U} : \frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}} \vec{v}_0 \right) \end{aligned} \quad (2.54)$$

3. On prend comme variables indépendantes non plus \vec{r} , \vec{v}_i et t , mais \vec{r} , \vec{V}_i et t . Cette opération est suggérée par l'expression de f_i^0 donnée par la relation (2.1).
4. On effectue les dérivations indiquées et on élimine les dérivées par rapport au temps grâce aux nouvelles équations de transfert (2.54).

Dans ce cas l'équation (2.52) devient :

$$\begin{aligned} f_i^{[0]} \left\{ \frac{n}{n_i} (\vec{V}_i \vec{d}_i) + \left(\overleftarrow{b}_i : \frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}} \vec{v}_0 \right) - \left(\frac{5}{2} - W_i^2 \right) \left(\vec{V}_i \frac{\vec{\partial} \ln T}{\partial \vec{r}} \right) \right\} \\ = \sum_{j=1}^{\nu} \int \int \int f_i^{[0]} f_j^{[0]} (\Phi'_i + \Phi'_j - \Phi_i - \Phi_j) g_{ij} b d b d \varepsilon d \vec{v}_j \end{aligned} \quad (2.55)$$

où

$$\begin{cases} \vec{d}_i = \frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}} \left(\frac{n_i}{n} \right) + \left(\frac{n_i}{n} - \frac{n_i m_i}{\rho} \right) \frac{\vec{\partial} \ln p}{\partial \vec{r}} - \left(\frac{n_i m_i}{\rho p} \right) \left(\frac{\rho}{m_i} \vec{X}_i - \sum_j n_j \vec{X}_j \right) \\ \overleftarrow{b}_i = 2 \left(\vec{W}_i \vec{W}_j - \frac{1}{3} W_i^2 \overleftarrow{U} \right) \end{cases} \quad (2.56)$$

2.6 Equations intégrales

Des considérations d'ordre générale sur l'équation (2.55) nous permettent de prévoir la forme de la fonction inconnue Φ_i [23].

La fonction Φ_i , comme $f_i^{[0]}$, est un scalaire, il suffit donc de considérer seulement les solutions scalaires de l'équation (2.55).

Le second membre de cette équation est linéaire en Φ_i , le premier membre est linéaire par rapport aux dérivées relatives à l'espace (\vec{r}) de T , de \vec{v}_0 et de n_i .

Puisque le premier membre doit être aussi linéaire en Φ_i , la solution la plus générale Φ_i est la somme de trois quantités :

1. Une combinaison linéaire des composantes de $\frac{\vec{\partial} T}{\partial \vec{r}}$: elle ne peut résulter que du produit scalaire de $\frac{\partial T}{\partial \vec{r}}$ et d'un autre vecteur.
2. Une combinaison linéaire des composantes de $\frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}} \vec{v}_0$: elle ne peut résulter que du produit scalaire de $\frac{\partial}{\partial \vec{r}} \vec{v}_0$ et d'un autre tenseur du second ordre.
3. Une combinaison linéaire des composantes de $\frac{\vec{\partial} n_i}{\partial \vec{r}}$: elle ne peut résulter que du produit scalaire des \vec{d}_j avec des vecteurs du genre $\vec{C}_i^{(j)}$. Cette dernière suggestion provient du fait que les autres espèces interviennent dans l'expression de \vec{d}_i .

On peut donc présumer pour Φ_i la forme générale :

$$\Phi_i = - \left(\vec{A}_i \frac{\vec{\partial} \ln T}{\partial \vec{r}} \right) - \left(\vec{B}_i : \frac{\vec{\partial}}{\partial \vec{r}} \vec{v}_0 \right) + n \sum_j (\vec{C}_i^{(j)} \vec{d}_j) \quad (2.57)$$

où les nouvelles inconnues \vec{A}_i , \vec{B}_i et $\vec{C}_i^{(j)}$ sont fonction de \vec{W}_i , n_i , et T .

D'après la définition (2.56) de \vec{d}_i , on a $\sum_i \vec{d}_i = 0$ par conséquent s'il y a ν composants dans le mélange gazeux, il y a seulement que $(\nu - 1) \vec{d}_i$ indépendants. On peut donc poser un des $\vec{C}_i^{(j)}$ égale à zéro pour chaque espèce i , soit par exemple $\vec{C}_i^{(j)} = 0$.

En reportant la valeur de Φ_i définie par (2.57) dans l'équation (2.55) nous obtenons des équations intégrales distinctes pour les fonctions inconnues $\vec{C}_i^{(j)}$, \vec{A}_i et \vec{B}_i .

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{n_i} f_i^{(0)} (\delta_{ih} - \delta_{ik}) \vec{V}_i = \\ \sum_j \int \int \int \left\{ \vec{C}_i^{(h)'} + \vec{C}_j^{(h)'} - \vec{C}_i^{(k)'} - \vec{C}_j^{(k)'} - \vec{C}_i^{(h)} - \vec{C}_j^{(h)} + \vec{C}_i^{(k)} + \vec{C}_j^{(k)} \right\} f_i^{(0)} f_j^{(0)} g_{ij} b db d\varepsilon d\vec{v}_j \\ f_i^{(0)} \overleftarrow{b}_i = - \sum_j \int \int \int \left\{ \overleftarrow{B}_i' + \overleftarrow{B}_j' - \overleftarrow{B}_i - \overleftarrow{B}_j \right\} g_{ij} b db d\varepsilon d\vec{v}_j \\ f_i^{(0)} \left(\frac{5}{2} - W_i^2 \right) \vec{V}_i = \sum_j \int \int \int \left\{ \overrightarrow{A}_i' - \overrightarrow{A}_j' + \overrightarrow{A}_i - \overrightarrow{A}_j \right\} f_i^{[0]} f_j^{[0]} g_{ij} b db d\varepsilon d\vec{v}_j \end{array} \right. \quad (2.58)$$

δ_{ih} symbole de kronecker $\begin{cases} \delta_{ih} = 1 \text{ si } i = h, \\ \delta_{ih} = 0 \text{ sinon.} \end{cases}$

Les symétrisations des seconds membres des équations (2.58) sont obtenues pour une large part à partir du fait que $\sum_{j=1}^{\nu} \vec{d}_j = 0$.

\overrightarrow{A}_i doit être formé à partir de \overrightarrow{W}_i (seul vecteur variable), des n_j et T , les seuls vecteurs que l'on puisse ainsi former est du genre $\overrightarrow{A}_i = A_i(W_i) \overrightarrow{W}_i$ où A_i est une fonction scalaire dépendant de $W_i = |\overrightarrow{W}_i|$, de T et des n_j .

Des considérations semblables pour $\overrightarrow{C}_i^{(j)}$ et \overleftarrow{B}_i nous conduisent à envisager pour les équations des solutions de la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \overrightarrow{C}_i^{(j)} = \overrightarrow{W}_i C_i^{(j)}(W_i) \\ \overrightarrow{A}_i = \overrightarrow{W}_i A_i(W_i) \\ \overleftarrow{B}_i = \left\{ W_i W_i - \frac{1}{3} W_i^2 \overleftarrow{U} \right\} B_i(W_i) \end{array} \right. \quad (2.59)$$

Remarque :

$$\sum_{j=1}^{\nu} \overrightarrow{C}_i^{(j)} \vec{d}_j = \sum_{j \neq k} \overrightarrow{C}_i^{(j)} \vec{d}_j + \overrightarrow{C}_i^{(k)} \vec{d}_k \quad \forall k \in \{1, 2, \dots, \nu\}$$

$$\text{or } \sum_{j=1}^{\nu} \vec{d}_j = 0 \Rightarrow \vec{d}_k = - \sum_{j \neq k} \vec{d}_j$$

$$\text{donc } \sum_{j=1}^{\nu} \overrightarrow{C}_i^{(j)} \vec{d}_j = \sum_{j \neq k} \{ \overrightarrow{C}_i^{(j)} - \overrightarrow{C}_i^{(k)} \} \vec{d}_j = \sum_{j=1}^{\nu} \{ \overrightarrow{C}_i^{(j)} - \overrightarrow{C}_i^{(k)} \} \vec{d}_j$$

et il revient au même de considérer $\overrightarrow{C}_i^{(j)}$ ou $\overrightarrow{C}_i^{(j)} - \overrightarrow{C}_i^{(k)}$.

Les nouvelles fonctions inconnues $\overrightarrow{C}_i^{(j)} - \overrightarrow{C}_i^{(k)}$, \overrightarrow{A}_i et \overleftarrow{B}_i substituées à i doivent vérifier les conditions auxiliaires (2.53), lesquelles (pour des raisons de symétrie) se réduisent à :

$$\begin{cases} \sum_i \sqrt{m_i} \int (\{\vec{C}_i^{(j)} - \vec{C}_i^{(k)}\} \vec{W}_i) f_i^{[0]} d\vec{v}_i = 0 \\ \sum_i \sqrt{m_i} \int (\vec{A}_i \vec{W}_i) f_i^{[0]} d\vec{v}_i = 0 \end{cases} \quad (2.60)$$

Nous n'avons aucune condition pour les \overleftrightarrow{B}_i , par conséquent les équations (2.53) sont vérifiées quelle que soit la fonction arbitraire \overleftrightarrow{B}_i .

Le problème de la détermination de Φ_i se ramène donc au calcul des fonctions scalaires $C_i^{(j)}(W_i), B_i(W_i)$ et $A_i(W_i)$ grâce aux équations intégrales (2.58) et (2.60).

Pour se faire il existe deux méthodes équivalentes :

1. Méthode de Chapman et Cowling[23] :

Les quantités $C_i^{(j)}(W_i), B_i(W_i)$ et $A_i(W_i)$ sont développées en séries infinies de polynômes de Sonine. Les coefficients de transport sont alors obtenus en fonctions de rapports de déterminants infinis. On peut en pratique se borner à ne considérer que quelques éléments de ces déterminants, car la convergence des rapports est très rapide à mesure que l'on introduit de nouvelles lignes et de nouvelles colonnes.

2. Méthode variationnelle [20] :

Elle est basée également sur le développement en séries de polynômes de Sonine des même quantités, mais on considère des séries finies. Nous allons l'utiliser dans la présente étude.

La similitude de forme des trois équations (2.58) nous permet de les remplacer symboliquement par une seule équation pour un tenseur inconnu \overleftrightarrow{T}_i :

$$\overleftrightarrow{R}_i^{(h,k)} = \sum_j \int \int \int \left(\overleftrightarrow{T}_i^{(h,k)'} + \overleftrightarrow{T}_j^{(h,k)'} + \overleftrightarrow{T}_i^{(h,k)} + \overleftrightarrow{T}_j^{(h,k)} \right) f_i^{[0]} f_j^{[0]} g_{ij} b db d\varepsilon d\vec{v}_j \quad (2.61)$$

La correspondance entre les symboles $\overleftrightarrow{R}_i^{(h,k)}$ et $\overleftrightarrow{T}_i^{(h,k)}$ et leurs homologues dans les équations (2.58) est donnée par le tableau suivant :

équation	$\overleftrightarrow{R}_i^{(h,k)}$	$\overleftrightarrow{T}_i^{(h,k)}$
1 ^{ère} équation de (2.58)	$\frac{1}{n_i} f_i^{[0]} (\delta_{ih} - \delta_{ik}) \vec{V}_i$	$\vec{C}_i^{(h)} - \vec{C}_i^{(k)}$
2 ^{ème} équation de (2.58)	$-2f_i^{[0]} \left(\vec{W}_i \vec{W}_i - \frac{1}{3} W_i^2 \overleftrightarrow{U} \right)$	\overleftrightarrow{B}_i
2 ^{ème} équation de (2.58)	$f_i^{[0]} \left(\frac{5}{2} - W_i^2 \right) \vec{V}_i$	\vec{A}_i

L'indice i dans \overleftrightarrow{T}_i indique que ce tenseur est fonction de \overrightarrow{W}_i , il en est de même pour \overleftrightarrow{R} , \overrightarrow{A} , \overleftrightarrow{B} et \overleftrightarrow{C} .

Nous nous proposons donc de rechercher une solution approchée à l'équation integral de \overleftrightarrow{T}_i dans l'équation (2.61) par la méthode variationnelle. Cette équation, ajoutée à celle de l'équation auxiliaire :

$$\sum_i \sqrt{m_i} \int (\overleftrightarrow{T}_i \overrightarrow{W}_i) f_i^{[0]} d\overrightarrow{v}_i = 0 \quad (2.62)$$

qui est équivalente aux équations donnés par (2.60), détermine de façon unique le tenseur inconnu $\overleftrightarrow{T}_i^{(h,k)}$.

2.6.1 Théorèmes importants sur les intégrales

Soient \overleftrightarrow{G}_i et \overleftrightarrow{H}_i deux tenseur quelconque, en générale fonction à la fois de \overrightarrow{W}_i et de \overrightarrow{W}_j .

Nous définissons l'intégral ou l'opérateur de crochet par [20] :

$$\left[\overleftrightarrow{G}_{ij}; \overleftrightarrow{H}_{ij} \right]_{ij} = \frac{1}{n_i n_j} \int \int \int \int \left(\overleftrightarrow{G}_{ij} : (\overleftrightarrow{H}_{ij}' - \overleftrightarrow{H}_{ij}) \right) f_i^{[0]} f_j^{[0]} g_{ij} b \, d\varepsilon \, d\overrightarrow{v}_i \, d\overrightarrow{v}_j \quad (2.63)$$

Remarques :

1. Les double indice ij attaché au crochet rappelle que l'on intègre par rapport aux variables \overrightarrow{v}_i et \overrightarrow{v}_j .
2. Les double indice ij des symboles sous les crochets indique que ces tenseurs sont fonction de \overrightarrow{W}_i et \overrightarrow{W}_j .
3. Les intégrales crochet jouent un rôle fondamentale dans la formulation des coefficients de transports (Chapitre III).

Pour des considérations de symétrie [20] on montre que la forme précédente est équivalente à [20] :

$$\left[\overleftrightarrow{G}_{ij}; \overleftrightarrow{H}_{ij} \right]_{ij} = \frac{1}{2n_i n_j} \int \int \int \int \left((\overleftrightarrow{G}_{ij}' - \overleftrightarrow{G}_{ij}) : (\overleftrightarrow{H}_{ij}' - \overleftrightarrow{H}_{ij}) \right) f_i^{[0]} f_j^{[0]} g_{ij} b \, d\varepsilon \, d\overrightarrow{v}_i \, d\overrightarrow{v}_j \quad (2.64)$$

d'où l'on déduit que :

$$\left[\overleftrightarrow{G}_{ij}; \overleftrightarrow{H}_{ij} \right]_{ij} = \left[\overleftrightarrow{H}_{ij}; \overleftrightarrow{G}_{ij} \right]_{ij} = \left[\overleftrightarrow{G}_{ij}; \overleftrightarrow{H}_{ij} \right]_{ji} = \left[\overleftrightarrow{H}_{ij}; \overleftrightarrow{G}_{ij} \right]_{ji} \quad (2.65)$$

L'opérateur crochet est linéaire [20], en effet si :

$$\begin{cases} \overleftrightarrow{G}_{ij} = \overleftrightarrow{K}_i + \overleftrightarrow{L}_j \\ \overleftrightarrow{H}_{ij} = \overleftrightarrow{M}_i + \overleftrightarrow{N}_j \end{cases}$$

où :

$$\begin{cases} \overleftrightarrow{K}_i, \overleftrightarrow{M}_i \text{ dépendent seulement de } \overleftrightarrow{W}_i \\ \overleftrightarrow{L}_i, \overleftrightarrow{N}_i \text{ dépendent seulement de } \overleftrightarrow{W}_j \end{cases}$$

alors :

$$\left[\overleftrightarrow{K}_i + \overleftrightarrow{L}_j ; \overleftrightarrow{M}_i + \overleftrightarrow{N}_j \right]_{ij} = \left[\overleftrightarrow{K}_i ; \overleftrightarrow{M}_i \right]_{ij} + \left[\overleftrightarrow{K}_i ; \overleftrightarrow{N}_j \right]_{ij} + \left[\overleftrightarrow{L}_j ; \overleftrightarrow{M}_i \right]_{ij} + \left[\overleftrightarrow{L}_j ; \overleftrightarrow{N}_j \right]_{ij} \quad (2.66)$$

Considérant maintenant deux ensembles de fonctions tensorielles $\overleftrightarrow{K}_i, \overleftrightarrow{L}_i$ avec $i \in \{1, 2, \dots, \nu\}$ et définissons un nouvel opérateur accolade qui est une généralisation de l'opérateur crochet [20] :

$$\left\{ \overleftrightarrow{K} ; \overleftrightarrow{L} \right\} = \sum_{ij} n_i n_j \left[\overleftrightarrow{K}_i + \overleftrightarrow{K}_j ; \overleftrightarrow{L}_i + \overleftrightarrow{L}_j \right]_{ij} \quad (2.67)$$

avec $i, j \in \{1, 2, \dots, \nu\}$

Les opérateurs vérifient les propriétés [20] :

$$\left\{ \overleftrightarrow{K} ; \overleftrightarrow{L} \right\} = \left\{ \overleftrightarrow{L} ; \overleftrightarrow{K} \right\} \quad (2.68)$$

$$\left\{ \overleftrightarrow{K} ; \overleftrightarrow{L} + \overleftrightarrow{M} \right\} = \left\{ \overleftrightarrow{K} ; \overleftrightarrow{L} \right\} + \left\{ \overleftrightarrow{K} ; \overleftrightarrow{M} \right\} \quad (2.69)$$

Remarque importantes :

Dans la mesure où $\left\{ \overleftrightarrow{K} ; \overleftrightarrow{K} \right\}$ représente une somme d'intégrales dont tous les arguments sont non négatifs, donc :

$$\left\{ \overleftrightarrow{K} ; \overleftrightarrow{K} \right\} \geq 0 \quad (2.70)$$

On montre que [20][23] :

– $\left\{ \overleftrightarrow{K} ; \overleftrightarrow{K} \right\} = 0$ équivalent à dire que \overleftrightarrow{K} est une combinaison linéaire des invariants sommatoires.

– La seule combinaison linéaire des invariants sommatoires qui satisfasse la condition auxiliaire (2.62) est identiquement nulle.

En conséquence si nous considérons seulement des fonctions tensorielles \overleftrightarrow{K} , satisfaisant (2.62) :

$$\left\{ \overleftrightarrow{K} ; \overleftrightarrow{K} \right\} \geq 0 \iff \overleftrightarrow{K}_i = 0 \quad \forall i \in 1, 2, \dots, \nu \quad (2.71)$$

2.7 Principe variationnel

Nous pouvons maintenant utiliser un principe variationnel [20] pour obtenir une solution approchée des équations (2.61). On emploie comme fonction d'essai un ensemble de fonctions $\overleftrightarrow{t}_i^{(h,k)}$ telles que :

$$\int (\overleftrightarrow{t}_i^{(h,k)} ; \overleftrightarrow{R}_i^{(h,k)}) d\overrightarrow{v}_i = - \sum_j n_i n_j \left[\overleftrightarrow{t}_i^{(h,k)} ; \overleftrightarrow{t}_i^{(h,k)} + \overleftrightarrow{t}_j^{(h,k)} \right]_{ij} \quad (2.72)$$

Si l'on effectue le produit deux fois contracté des deux membres de l'équation (2.61) par $\overleftrightarrow{t}_i^{(h,k)}$ et si l'on intègre par rapport à \overrightarrow{v}_i , on obtient :

$$\int (\overleftrightarrow{t}_i^{(h,k)} ; \overleftrightarrow{R}_i^{(h,k)}) d\overrightarrow{v}_i = - \sum_j n_i n_j \left[\overleftrightarrow{t}_i^{(h,k)} ; \overleftrightarrow{T}_i^{(h,k)} + \overleftrightarrow{T}_j^{(h,k)} \right]_{ij} \quad (2.73)$$

En égalant les membres de droites des équations (2.72) et (2.73), puis en sommant par rapport à i , après avoir utilisé les relations de symétrie (2.65) et la définition de l'opérateur accolade (2.67), nous obtenons :

$$\left\{ \overleftrightarrow{t}^{(h,k)} ; \overleftrightarrow{T}^{(h,k)} \right\} = \left\{ \overleftrightarrow{t}^{(h,k)} ; \overleftrightarrow{t}^{(h,k)} \right\} \quad (2.74)$$

D'après la relation (2.70) :

$$\left\{ \overleftrightarrow{T}^{(h,k)} - \overleftrightarrow{t}^{(h,k)} ; \overleftrightarrow{T}^{(h,k)} - \overleftrightarrow{t}^{(h,k)} \right\} \geq 0 \quad (2.75)$$

alors en tenant compte de (2.69) et (2.74) nous obtenons :

$$\left\{ \overleftrightarrow{t}^{(h,k)} ; \overleftrightarrow{t}^{(h,k)} \right\} \leq \left\{ \overleftrightarrow{T}^{(h,k)} ; \overleftrightarrow{T}^{(h,k)} \right\} \quad (2.76)$$

Qui est le principe de la méthode variationnelle pour obtenir des approximations des solutions $\overleftrightarrow{T}_i^{(h,k)}$.

De façon plus précise, la méthode de solution est la suivante :

Nous choisissons un ensemble de fonction d'essai $t_i^{\leftrightarrow(h,k)}$ ($i = 1, 2, \dots, \nu$), contenant un certain nombre de paramètres arbitraires et qui satisfait l'équation (2.62).

Par conséquent d'après (2.76) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \overleftrightarrow{T}^{\leftrightarrow(h,k)} - t^{\leftrightarrow(h,k)} \\ \overleftrightarrow{T}^{\leftrightarrow(h,k)} - t^{\leftrightarrow(h,k)} \end{array} \right\} = 0 \iff \overleftrightarrow{T}_i^{\leftrightarrow(h,k)} = t_i^{\leftrightarrow(h,k)} \quad \forall i \in \{1, 2, \dots, \nu\}$$

On en conclut que la meilleure approximation de la vraie solution de l'équation (2.61) est obtenue en rendant l'accolade de gauche de l'inequations (2.76) maximum par rapport à tous les paramètres disponibles dans l'ensemble des fonctions d'essais.

Par conséquent la maximisation de $\left\{ \begin{array}{l} \overleftrightarrow{t}^{\leftrightarrow(h,k)} \\ \overleftrightarrow{t}^{\leftrightarrow(h,k)} \end{array} \right\}$ peut s'exprimer :

$$\delta \left\{ \begin{array}{l} \overleftrightarrow{t}^{\leftrightarrow(h,k)} \\ \overleftrightarrow{t}^{\leftrightarrow(h,k)} \end{array} \right\} = -2\delta \int (\overleftrightarrow{t}_i^{\leftrightarrow(h,k)} : \overleftrightarrow{R}_i^{\leftrightarrow(h,k)}) d\overleftrightarrow{v}_i = 0 \quad (2.77)$$

où δ signifie variation de.

La condition (2.72) qui limite le choix des fonctions d'essai et la condition (2.77) constituent la base de la méthode variationnelle de résolution des équations intégrales (2.61).

2.7.1 Application du principe variationnel (développement polynômial de Sonine)

Les polynomes de Sonine sont définis comme suit [23] :

$$S_n^{(m)}(x) = \sum_j \frac{(-1)^j (m+n)!}{(n+j)!(m-j)!j!} x^j \quad (2.78)$$

Ces polynomes satisfont la condition d'orthogonalité [20] :

$$\int_0^\infty x^n e^{-x} S_n^{(m)}(x) S_n^{(m')}(x) dx = \frac{(m+n)!}{m!} \delta_{mm'} \quad (2.79)$$

L'avantage de l'utilisation de ces polynômes provient surtout du fait que dans deux cas particuliers la relation d'orthogonalité (2.79), qui nous permet d'écrire si l'on pose $x = W_i^2$ avec $W_i = |\overleftrightarrow{W}_i|$:

$$\int f_i^{[0]} S_{3/2}^{(m)}(W_i^2) V_i^2 d\overleftrightarrow{V}_i = \frac{3n_i K T}{m_i} \delta_{m0} \quad (2.80)$$

$$\int f_i^{[0]} S_{5/2}^{(m)}(W_i^2) V_i^4 d\vec{V}_i = 15n_i \left(\frac{KT}{m_i} \right)^2 \delta_{m0} \quad (2.81)$$

Prenons maintenant comme fonction d'essai $\overleftarrow{t}^{(h,k)}$, une combinaison linéaire finie des polynôme de Sonine $S_n^{(m)}(W_i^2)$ soit :

$$\overleftarrow{t}_i^{(h,k)}(\vec{W}_i) = \overleftarrow{W}_i \sum_{m=0}^{\xi-1} t_{im}^{(h,k)}(\xi) S_n^{(m)}(W_i^2) \quad (2.82)$$

Les valeurs de l'indice n et les significations des \overleftarrow{W}_i sont données dans le tableau suivant :

Valeur de $\overleftarrow{T}^{(h,k)}$	Valeur de l'indice n	Valeur de \overleftarrow{W}	Valeur de de $\overleftarrow{t}_{im}^{(h,k)}$
\vec{A}_i	3/2	\vec{W}_i	$a_{im}(\xi)$
\vec{B}_i	5/2	$\vec{W}_i \vec{W}_i - \frac{1}{3} W_i^2 \vec{U}$	$b_{im}(\xi)$
$\vec{C}_i^{(h)} - \vec{C}_i^{(k)}$	3/2	\vec{W}_i	$c_{im}^{h,k}(\xi)$

Posons ensuite :

$$R_{im}^{(h,k)} = \int (\overleftarrow{R}_i^{(h,k)} : \overleftarrow{W}_i) S_n^{(m)}(W_i^2) d\vec{V}_i \quad (2.83)$$

et

$$g^{(h,k)} = \sum_{i,m} t_{im}^{(h,k)} R_{im}^{(h,k)} \quad (2.84)$$

Ces dernières définitions permettent d'écrire les contraintes (2.72) sous la forme condensée :

$$w_i^{(h,k)} = 0 \quad (2.85)$$

où

$$w_i^{(h,k)} = \sum_{m=0}^{\xi-1} t_{im}^{(h,k)} R_{im}^{(h,k)} + \sum_j \sum_{m=0}^{\xi-1} \sum_{m'=0}^{\xi-1} n_i n_j t_{im}^{(h,k)} \left[\begin{array}{c} t_{im'}^{(h,k)} \left[\overleftarrow{W}_i S_n^{(m)}(W_i^2); \overleftarrow{W}_i S_n^{(m')}(W_i^2) \right]_{ij} \\ + t_{jm'}^{(h,k)} \left[\overleftarrow{W}_i S_n^{(m)}(W_i^2); \overleftarrow{W}_j S_n^{(m')}(W_j^2) \right]_{ij} \end{array} \right] \quad (2.86)$$

et le critère variationnel (2.77) prend la forme simple :

$$\delta g^{(h,k)} = 0 \quad (2.87)$$

Le problème se ramène maintenant à déterminer des valeurs des $t_{im}^{(h,k)}$ correspondant à l'extremum de $g^{(h,k)}$ soumis aux équations de contrainte(2.85). Pour résoudre ce problème nous utilisons la

méthode du multiplicateur de Lagrange [26] que nous désignons par $\lambda_i^{(h,k)}$ [20].
Les équations (2.85) jointes aux équations :

$$\left(\frac{\partial g^{(h,k)}}{\partial t_{im}^{(h,k)}} \right) + \sum_{r=0}^{\nu} \lambda_r^{(h,k)} \left(\frac{\partial w_r^{(h,k)}}{\partial t_{im}^{(h,k)}} \right) = 0 \quad (2.88)$$

sont suffisantes pour déterminer les $\lambda_i^{(h,k)}$ ainsi que les $t_{im}^{(h,k)}$ correspondant à l'extremum de $g^{(h,k)}$.

En effectuant les dérivations indiquées, l'ensemble des équations (2.88) s'écrit :

$$\left[1 + \lambda_i^{(h,k)} \right] R_{im}^{(h,k)} + \sum_{j=1}^{\nu} \sum_{m'=0}^{\xi-1} n_i n_j \left\{ \begin{array}{l} 2\lambda_i^{(h,k)} t_{im'}^{(h,k)} \left[\overleftarrow{W}_i S_n^{(m)}(W_i^2); \overleftarrow{W}_i S_n^{(m')}(W_i^2) \right]_{ij} \\ + (\lambda_i^{(h,k)} + \lambda_j^{(h,k)}) t_{jm'}^{(h,k)} \left[\overleftarrow{W}_i S_n^{(m)}(W_i^2); \overleftarrow{W}_j S_n^{(m')}(W_j^2) \right]_{ij} \end{array} \right\} \quad (2.89)$$

L'unique solution de ce système d'équations ajoutés à (2.85) est :

$$\lambda_i^{(h,k)} = 1 \quad i = 1, 2, \dots, \nu \quad (2.90)$$

les constantes $t_{jm}^{(h,k)}$ sont alors déterminées par (2.89) ,avec $\lambda_i^{(h,k)} = 1$, dans ce cas les équations (2.88) peuvent être écrites sous la forme suivante :

$$\sum_{j=1}^{\nu} \sum_{m'=0}^{\xi-1} Q_{ij}^{mm'} t_{im'}^{(h,k)}(\xi) = -R_{im}^{(h,k)} \quad (2.91)$$

où :

$$Q_{ij}^{mm'} = \sum_{l=1}^{\nu} n_i n_l \left\{ \delta_{ij} \left[\overleftarrow{W}_i S_n^{(m)}(W_i^2); \overleftarrow{W}_i S_n^{(m')}(W_i^2) \right]_{il} + \delta_{il} \left[\overleftarrow{W}_i S_n^{(m)}(W_i^2); \overleftarrow{W}_l S_n^{(m')}(W_l^2) \right]_{il} \right\} \quad (2.92)$$

Remarques importantes :

1. Si $T_i^{\longleftrightarrow(h,k)} = B_i$ (et $t_{im}^{\longleftrightarrow(h,k)} = b_i$) les équations (2.91) sont linéairement indépendantes et par suite on peut déterminer tous les b_{im} à partir de ces équations.
2. Si $T_i^{\longleftrightarrow(h,k)} = \overrightarrow{A}_i$ ou $T_i^{\longleftrightarrow(h,k)} = \overrightarrow{C}_i^h - \overrightarrow{C}_i^k$, on peut montrer que pour $m = 0$ le système (2.91) contient une équation qui fait double emploi avec une autre.

considérons alors la condition auxiliaire qui s'écrit en fonction de $t_{im}^{\longleftrightarrow(h,k)}$:

$$\sum_{i=1}^{\nu} \sum_{m'=0}^{\xi-1} \sqrt{m_i} t_{im}^{\longleftrightarrow(h,k)}(\xi) \int W_i^2 S_{3/2}^{(m)}(W_i^2) f_i^{[0]} d\overrightarrow{V}_i = 0 \quad (2.93)$$

Les termes de cette somme en vertu de la condition d'orthogonalité étant nuls pour $m \neq 0$, elle se réduit à :

$$\sum_{i=1}^{\nu} \sqrt{m_i} t_{i0}^{\longleftrightarrow(h,k)}(\xi) \left(\frac{2n_i}{\sqrt{\pi}} \right) \Gamma \left(\frac{5}{2} \right) = 0 \quad (2.94)$$

Par conséquent :

$$\sum_{i=1}^{\nu} n_i \sqrt{m_i} t_{i0}^{\longleftrightarrow(h,k)}(\xi) = 0 \quad (2.95)$$

Nous utilisons (2.95) pour remplacer l'équation manquante dans le système (2.91).

3. On peut grouper les deux cas précédents en un seul en écrivant sous la nouvelle forme :

$$\sum_{j=1}^{\nu} \sum_{m'=0}^{\xi-1} \tilde{Q}_{ij}^{mm'} t_{im'}^{(h,k)}(\xi) = -R_{im}^{(h,k)} \quad (2.96)$$

où

$$\tilde{Q}_{ij}^{mm'} = \begin{cases} Q_{ij}^{mm'} & \text{si } t_{jm'}^{(h,k)} = b_{jm'} \\ Q_{ij}^{mm'} - \frac{n_j \sqrt{m_j}}{n_i \sqrt{m_i}} Q_{ii}^{mm'} \delta_{m0} \delta_{m'0} & \text{si } t_{jm'}^{(h,k)} = a_{jm'} \text{ ou } c_{jm'} \end{cases} \quad (2.97)$$

Les équations (2.96) nous permettent d'obtenir les $t_{im}^{(h,k)}$ qui donnent les fonctions \vec{A}_i , \overleftarrow{B}_i et \vec{C}_i , lesquelles à leur tour donnent la fonction Φ_i et par conséquent la fonction de distribution f_i jusqu'au premier ordre. Cette connaissance permet de déterminer les coefficients de transport (Chapitre III).

Chapitre 3

Formulation des coefficients de transport

Nous avons établi au (§ 1.3) les expressions intégrales des vecteurs flux, qui décrivent le flux de masse, de quantité de mouvement et d'énergie. Le calcul de ces intégrales exige la connaissance de la fonction de distribution f_i . Nous avons obtenu une approximation de la forme $f_i = f_i^{[0]}(1 + \Phi_i)$. L'expression de Φ_i donnée par (2.57), est utilisé dans les intégrales donnant les vecteurs flux, ce qui nous permet d'obtenir des expressions pour la vitesse de diffusion, le tenseur de pression et le vecteur flux de chaleur, en fonction des intégrales des fonctions $A_i(W_i)$, $B_i(W_i)$, $C_i^{(j)}(W_i)$ [20].

3.1 Coefficients de diffusion et de diffusion thermique en fonction des coefficients du développement de Sonine

L'intégrale de la vitesse de diffusion (2.7), écrite en termes des Φ_i est :

$$\overline{\vec{V}}_i = \frac{1}{n_i} \int \vec{V}_i f_i d\vec{V}_i = \frac{1}{n_i} \int \vec{V}_i \Phi_i f_i^{[0]} d\vec{V}_i \quad (3.1)$$

En remplaçons Φ_i par son expression (2.57) et en remarquant que pour des raisons de symétrie l'intégral contenant \overleftrightarrow{B}_j s'annule, nous obtenons :

$$\overline{\vec{V}}_i = \frac{1}{n_i} \int \left\{ n \sum_j (\overrightarrow{C}_i^{(j)} \cdot \overrightarrow{d}_j) \left(\overrightarrow{A}_i \frac{\partial \ln T}{\partial \overrightarrow{r}} \right) \right\} \vec{V}_i f_i^{[0]} d\vec{V}_i \quad (3.2)$$

En utilisant d'une part les formules (2.59) donnant les expressions des fonctions \overrightarrow{A}_i et $\overrightarrow{C}_i^{(j)}$, d'autre part le théorème suivant :

Si $F(r)$ est une fonction quelconque de $r = |\overrightarrow{r}|$

$$\int F(r) \vec{r} \vec{r} d\vec{r} = \frac{1}{3} \overleftarrow{U} \int F(r) r^2 d\vec{r} \quad (3.3)$$

la nouvelle expression de $\overline{\vec{V}}_i$ devient :

$$\overline{\vec{V}}_i = \left(\frac{n^2}{n_i \rho} \right) \sum_j m_j D_{ij} \vec{d}_j - \frac{1}{n_i m_i} D_i^T \frac{\partial \ln T}{\partial \vec{r}} \quad (3.4)$$

où D_{ij} et D_i^T sont respectivement le coefficient de diffusion ordinaire et le coefficient de diffusion thermique, ils sont définis par :

$$D_{ij} = \frac{\rho}{3nm_i} \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} \int C_i^{(j)}(W_i) W_i^2 f_i^{[0]} d\vec{V}_i \quad (3.5)$$

$$D_i^T = \frac{m_i}{3} \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} \int A_i^{(j)}(W_i) W_i^2 f_i^{[0]} d\vec{V}_i \quad (3.6)$$

D'après la relation (2.82) et le tableau lui faisant suite, à $\vec{C}_i^{(h)} - \vec{C}_i^{(k)}$ correspond la fonction d'essai :

$$\vec{t}_i^{(h,k)}(\vec{W}_i) = \vec{W}_i \sum_{m=0}^{\xi-1} c_{im}^{(h,k)}(\xi) S_{3/2}^{(m)}(W_i^2) \quad (3.7)$$

On a $\vec{T} = \vec{C}_i^{(j)} - \vec{C}_i^{(i)}$, il faut prendre $h = j$ et $k = i$ ce qui nous donne la fonction d'essai :

$$\vec{t}_i^{(j,i)}(\vec{W}_i) = \vec{W}_i \sum_{m=0}^{\xi-1} c_{im}^{(j,i)}(\xi) S_{3/2}^{(m)}(W_i^2) \quad (3.8)$$

donc :

$$C_i^{(j)}(W_i) = \sum_{m=0}^{\xi-1} c_{im}^{(j,i)}(\xi) S_{3/2}^{(m)}(W_i^2) \quad (3.9)$$

et

$$D_{ij}(\xi) = \frac{\rho}{3nm_j} \sqrt{\frac{m_i}{2kT}} \sum_{m=0}^{\xi-1} c_{im}^{(j,i)}(\xi) \int V_i^2 S_{3/2}^{(m)}(W_i^2) f_i^{[0]} d\vec{V}_i \quad (3.10)$$

Remarque importante[21] :

Nous avons posé $C_i^{(i)} = 0$ ce qui implique $D_{ii} = 0$.

Pour obtenir \vec{A}_i nous utilisons la formule (2.82) et le tableau lui faisant suite :

$$\vec{t}_i^{(j,i)}(\vec{W}_i) = \vec{W}_i \sum_{m=0}^{\xi-1} a_{im}(\xi) S_{3/2}^{(m)}(W_i^2) \quad (3.11)$$

$$A_i(W_i) = \sum_{m=0}^{\xi-1} c_{im}^{(j,i)}(\xi) S_{3/2}^{(m)}(W_i^2) \quad (3.12)$$

et :

$$D_i^T = \frac{m_i}{3} \sqrt{\frac{m_i}{2kT}} \sum_{m=0}^{\xi-1} a_{im}(\xi) \int V_i^2 S_{3/2}^{(m)}(W_i^2) f_i^{[0]} d\vec{V}_i \quad (3.13)$$

ξ étant le niveau d'approximation utilisés dans les coefficients du développement de Sonine. En utilisant la condition d'orthogonalité (2.80) , les termes dans les seconds membres des équations (3.9) et (3.10) serait nuls pour $m > 0$, on aura donc :

$$D_{ij}(\xi) = \frac{\rho n_i}{2n m_j} \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} c_{i0}^{(j,i)}(\xi) \quad (3.14)$$

$$D_i^T(\xi) = \frac{n_i m_i}{2} \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} a_{i0}^{(j,i)}(\xi) \quad (3.15)$$

Nous avons exprimé D_{ij} et D_i^T en fonction des coefficients du développement de Sonine d'ordre zéro seulement. C'est à dire qu'aussi nombreux que soient les termes utilisés dans le développement (ou encore en dépit de la valeur de ξ), c'est seulement le coefficient zéro qui reste après l'application de la condition d'orthogonalité. Cependant les valeurs de $c_{i0}^{(j,i)}(\xi)$ et de $a_{i0}^{(j,i)}(\xi)$ dépendent de ξ [21].

3.2 Coefficient de viscosité en fonction des coefficients du développement de Sonine

Le tenseur de pression a pour expression :

$$\overleftrightarrow{P} = \sum_j m_j \int \vec{V}_j \vec{V}_j f_j d\vec{V}_j \quad (3.16)$$

\overleftrightarrow{P} peut être exprimé en fonction de Φ_i (3.16) et devient :

$$\overleftarrow{P} = \sum_j m_j \left\{ \int \overrightarrow{V}_j \overrightarrow{V}_j d\overrightarrow{V}_j + \int \overrightarrow{V}_j \overrightarrow{V}_j f_i^{[0]} \Phi_j d\overrightarrow{V}_j \right\} \quad (3.17)$$

d'où

$$\overleftarrow{P} = P \overleftarrow{U} + \sum_j m_j \int \overrightarrow{V}_j \overrightarrow{V}_j f_i^{[0]} \Phi_j d\overrightarrow{V}_j \quad (3.18)$$

avec :

$$P = nkT \quad (3.19)$$

est la pression hydrostatique local de l'équilibre à la température et densité locales. En remplaçons Φ_j par son expression (2.57) et en remarquant que pour des raisons de symétrie les intégrales contenant \overrightarrow{A}_j et $\overrightarrow{C}_j^{(i)}$ disparaissent.

Nous obtenons alors :

$$\overleftarrow{P} = P \overleftarrow{U} - \sum_j m_j \int \overrightarrow{V}_j \overrightarrow{V}_j \left(\overleftarrow{B}_j : \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial \overrightarrow{r}} \overrightarrow{v}_0 \right) f_i^{[0]} d\overrightarrow{V}_j \quad (3.20)$$

En remplaçant \overleftarrow{B} par son expression (2.59) et pour des raisons de symétrie, on obtient :

$$\overleftarrow{P} = P \overleftarrow{U} - \left\{ \frac{2}{15} \sum_j \frac{m_j^2}{2kT} \int B_j(W_j) V_j^4 f_j^{[0]} d\overrightarrow{V}_j \right\} \overleftarrow{S} \quad (3.21)$$

où \overleftarrow{S} est le tenseur taux de cisaillement.

Le coefficient de viscosité η est défini par la relation :

$$\overleftarrow{P} = P \overleftarrow{U} - 2\eta \overleftarrow{S} \quad (3.22)$$

De la relation (3.18), il s'ensuit que le coefficient de viscosité est donné par :

$$\eta = \frac{1}{15} \sum_j \frac{m_j^2}{2kT} \int B_j(W_j) V_j^4 f_j^{[0]} d\overrightarrow{V}_j \quad (3.23)$$

En utilisant les coefficients de développement de Sonine (2.82), on obtient :

$$\eta(\xi) = \frac{1}{15} \sum_j \frac{m_j^2}{2kT} \sum_{m=0}^{\xi-1} b_{im}(\xi) \int S_{5/2}^{(m)}(W_j^2) V_j^4 f_j^{[0]} d\vec{V}_j \quad (3.24)$$

La relation d'orthogonalité peut être utiliser pour déterminer le terme intégrale, on obtient donc :

$$\eta(\xi) = \frac{1}{2} kT \sum_j n_j b_{j0}(\xi) \quad (3.25)$$

qui représente le coefficient de viscosité d'un mélange en fonction des coefficients du développement de Sonine $b_{j0}(\xi)$.

3.3 Coefficient de conductibilité thermique en fonction des coefficients du développement de Sonine

Le vecteur flux d'énergie \vec{q} en fonction de la fonction de perturbation Φ_j est donnée par :

$$\vec{q} = \frac{1}{2} \sum_j m_j \int V_j^2 \vec{V}_j f_j^{[0]} \Phi_j d\vec{V}_j \quad (3.26)$$

Si l'on remplace Φ_j par son expression (2.57), l'intégrale contenant \overleftrightarrow{B}_j disparaît (argument fonction impaire des composantes de \vec{V}_j), et on à :

$$\vec{q} = \frac{1}{2} \sum_j m_j \int \left\{ n \sum_k (\vec{C}_j^k \cdot \vec{d}_k) - \left(\vec{A}_j \cdot \frac{\vec{\partial} \ln T}{\partial \vec{r}} \right) \right\} V_j^2 \vec{V}_j f_j^{[0]} d\vec{V}_j \quad (3.27)$$

En utilisant les équations (2.59) donnant les formes des fonctions \vec{A}_i et $\vec{C}_i^{(j)}$, nous obtenons après avoir ajouté et retranché à la valeur de \vec{q} la quantité $\frac{5}{2} kT \sum_j n_j \vec{V}_j$:

$$\vec{q} = \frac{5}{2} kT \sum_j n_j \vec{V}_j - kT \sum_j \int \left\{ n \sum_k C_j^k(W_j) (\vec{W}_j \cdot \vec{d}_j) - \vec{A}_j(W_j) \left(\vec{W}_j \cdot \frac{\vec{\partial} \ln T}{\partial \vec{r}} \right) \right\} \times \left(\frac{5}{2} - W_j^2 \right) \vec{V}_j f_j^{[0]} d\vec{V}_j \quad (3.28)$$

Nous remplaçons \vec{V}_j par son expression (2.8) nous pouvons écrire :

$$\begin{aligned}
kT \sum_{j=1}^{\nu} \int n \sum_{k=1}^{\nu} C_j^k(W_j) (\vec{W}_j \cdot \vec{d}_k) \left(\frac{5}{2} - W_j^2 \right) \vec{V}_j f_j^{[0]} d\vec{V}_j \\
= \sqrt{2} (kT)^{3/2} n \sum_k \sum_j \frac{1}{\sqrt{m_j}} \int C_j^k(W_j) \left(\frac{5}{2} - W_j^2 \right) (\vec{W}_j \cdot \vec{d}_k) \vec{W}_j f_j^{[0]} d\vec{V}_j
\end{aligned} \tag{3.29}$$

et sachant que :

$$(\vec{W}_j \cdot \vec{d}_k) \vec{W}_j = (\vec{W}_j \vec{W}_j) \cdot \vec{d}_k \tag{3.30}$$

Nous obtenons alors :

$$\begin{aligned}
n \sqrt{2} (kT)^{3/2} \sum_{k=1}^{\nu} \left\{ \sum_{j=1}^{\nu} \frac{1}{\sqrt{m_j}} \int C_j^k(W_j) \left(\frac{5}{2} - W_j^2 \right) (\vec{W}_j \vec{W}_j) f_j^{[0]} d\vec{V}_j \right\} \cdot \vec{d}_k \\
= \frac{\sqrt{2}}{3} n (kT)^{3/2} \sum_{k=1}^{\nu} (\vec{U} \cdot \vec{d}_k) \sum_{j=1}^{\nu} \frac{1}{\sqrt{m_j}} \int C_j^k(W_j) \left(\frac{5}{2} - W_j^2 \right) W_j^2 f_j^{[0]} d\vec{V}_j \\
= \frac{\sqrt{2}}{3} n (kT)^{3/2} \sum_{k=1}^{\nu} \vec{d}_k \sum_{j=1}^{\nu} \frac{1}{\sqrt{m_j}} \int C_j^k(W_j) \left(\frac{5}{2} - W_j^2 \right) W_j^2 f_j^{[0]} d\vec{V}_j
\end{aligned} \tag{3.31}$$

De même :

$$\begin{aligned}
kT \sum_{j=1}^{\nu} \int A_j(W_j) (\vec{W}_j \cdot \frac{\vec{\partial} \ln T}{\partial \vec{r}}) \left(\frac{5}{2} - W_j^2 \right) \vec{V}_j f_j^{[0]} d\vec{V}_j \\
= \sqrt{2} (kT)^{3/2} n \sum_{j=1}^{\nu} \frac{1}{\sqrt{m_j}} \int A_j(W_j) (\vec{W}_j \cdot \frac{\vec{\partial} \ln T}{\partial \vec{r}}) \left(\frac{5}{2} - W_j^2 \right) \vec{W}_j f_j^{[0]} d\vec{V}_j \\
= \frac{\sqrt{2}}{3} n (kT)^{3/2} (\vec{U} \cdot \frac{\vec{\partial} \ln T}{\partial \vec{r}}) \sum_{j=1}^{\nu} \frac{1}{\sqrt{m_j}} \int A_j(W_j) \left(\frac{5}{2} - W_j^2 \right) W_j^2 f_j^{[0]} d\vec{V}_j \\
= \left\{ \frac{\sqrt{2}}{3} k \sqrt{kT} \sum_{j=1}^{\nu} \frac{1}{\sqrt{m_j}} \int A_j(W_j) \left(\frac{5}{2} - W_j^2 \right) W_j^2 f_j^{[0]} d\vec{V}_j \right\} \frac{\vec{\partial} T}{\partial \vec{r}} \\
= \chi' \frac{\vec{\partial} T}{\partial \vec{r}}
\end{aligned} \tag{3.32}$$

D'où :

$$\begin{aligned} \vec{q} &= \frac{5}{2}kT \sum_j n_j \vec{V}_j - \lambda' \frac{\vec{\partial} T}{\partial \vec{r}} \\ &\quad - \frac{\sqrt{2}}{3} n (kT)^{3/2} \sum_{k=1}^{\nu} \vec{d}_k \sum_{j=1}^{\nu} \frac{1}{\sqrt{m_j}} \int C_j^k(W_j) \left(\frac{5}{2} - W_j^2\right) W_j^2 f_j^{[0]} d\vec{V}_j \end{aligned} \quad (3.33)$$

Remarque :

Dans l'équation (3.32) on a remplacé $\frac{\vec{\partial} \ln T}{\partial \vec{r}}$ par $\frac{1}{T} \frac{\vec{\partial} T}{\partial \vec{r}}$.

En utilisant la troisième des équations (2.58) nous pouvons écrire :

$$f_j^{[0]} \left(\frac{5}{2} - W_j^2\right) W_j^2 \vec{V}_j \cdot \vec{C}_j(k) = \vec{C}_j(k) \sum_i \int \int \int \left\{ \vec{A}_i' + \vec{A}_j' - \vec{A}_i - \vec{A}_j \right\} f_i^{[0]} f_j^{[0]} g_{ij} b \, db \, d\varepsilon \, d\vec{v}_j \quad (3.34)$$

En intégrant les deux membres de cette dernière équation par rapport à \vec{V}_j et en symétrisant en suite par rapport à i et j et en utilisant le fait que $\sum_{k=1}^{\nu} \vec{d}_k = 0$, nous obtenons :

$$\begin{aligned} \vec{q} &= \frac{5}{2}kT \sum_j n_j \vec{V}_j - \lambda' \frac{\vec{\partial} T}{\partial \vec{r}} \\ &\quad - \frac{1}{6} n k T \sum_{k=1}^{\nu} \vec{d}_k \sum_{i,j=1}^{\nu} \int \int \int \int \left\{ \vec{A}_i' + \vec{A}_j' - \vec{A}_i - \vec{A}_j \right\} \left\{ \vec{C}_i^k + \vec{C}_j^k - \vec{C}_i^h - \vec{C}_j^h \right\} f_i^{[0]} g_{ij} b \, db \, d\varepsilon \, d\vec{v}_j \end{aligned} \quad (3.35)$$

Si nous multiplions scalairement les deux membres de la première équation par $\vec{A}_i = A_i(W_i) \vec{w}_i$, nous intégrons par rapport à \vec{V}_i , nous sommes par rapport à i et enfin nous symétrisons les résultats , il vient :

$$\begin{aligned} &\sum_{i=1}^{\nu} (\delta_{ih} - \delta_{ik}) \frac{1}{n_i} \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} \int A_i(W_i) W_i^2 f_i^{[0]} d\vec{V}_i \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{\nu} \int \int \int \int \left\{ \vec{A}_i' + \vec{A}_j' - \vec{A}_i - \vec{A}_j \right\} \left\{ \vec{C}_i^k + \vec{C}_j^k - \vec{C}_i^h - \vec{C}_j^h \right\} f_i^{[0]} f_j^{[0]} g_{ij} b \, db \, d\varepsilon \, d\vec{v}_j \end{aligned} \quad (3.36)$$

en utilisant ce dernier résultat :

$$\begin{aligned} \vec{q} = \frac{5}{2}kT \sum_j n_j \vec{V}_j - \lambda' \frac{\vec{\partial} T}{\partial \vec{r}} \\ + \frac{1}{3}nkT \sum_{k=1}^{\nu} \vec{d}_k \sum_{i=1}^{\nu} (\delta_{ih} - \delta_{ik}) \frac{1}{n_i} \sqrt{\frac{2KT}{m_i}} \int A_i(W_i) W_i^2 f_i^{[0]} d\vec{V}_i \end{aligned} \quad (3.37)$$

De l'équation (3.6) on peut directement déduire que :

$$\frac{1}{n_i} \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} \int A_i(W_i) W_i^2 f_i^{[0]} d\vec{V}_i = \frac{3D_i^T}{n_i m_i} \quad (3.38)$$

d'où

$$\vec{q} = \frac{5}{2}kT \sum_j n_j \vec{V}_j - \lambda' \frac{\vec{\partial} T}{\partial \vec{r}} + nKT \sum_k \vec{d}_k \sum_i (\delta_{ih} - \delta_{ik}) \frac{3D_i^T}{n_i m_i} \quad (3.39)$$

Or :

$$\sum_k \vec{d}_k \sum_i (\delta_{ih} - \delta_{ik}) \frac{3D_i^T}{n_i m_i} = \frac{3D_h^T}{n_h m_h} \sum_k \vec{d}_k - \sum_k \frac{1}{n_h m_h} D_k^T \vec{d}_k \quad (3.40)$$

mais comme $\sum_k \vec{d}_k = 0$

$$\sum_k \vec{d}_k \sum_i (\delta_{ih} - \delta_{ik}) \frac{3D_i^T}{n_i m_i} = - \sum_j \frac{1}{n_j m_j} D_j^T \vec{d}_j \quad (3.41)$$

et

$$\vec{q} = \frac{5}{2}kT \sum_j n_j \vec{V}_j - \lambda' \frac{\vec{\partial} T}{\partial \vec{r}} - nkT \sum_j \frac{1}{n_j m_j} D_j^T \vec{d}_j \quad (3.42)$$

Si les fonctions $A_i(W_i)$ sont exprimées comme des séries des polynômes de Sonine comme dans l'équation (2.82), l'expression de λ' (3.43) devient :

$$\lambda'(\xi) = -\frac{\sqrt{2}}{3}k\sqrt{kT} \sum_j \sum_{m=0}^{\xi-1} \frac{1}{\sqrt{m_j}} a_{jm}(\xi) \int S_{3/2}^{(m)}(W_j^2) \left(\frac{5}{2} - W_j^2\right) W_j^2 f_j^{[0]} d\vec{V}_j \quad (3.43)$$

alors, puisque :

$$S_{3/2}^{(1)}(W_j^2) = \frac{5}{2} - W_j^2 \quad (3.44)$$

De la condition d'orthogonalité des polynômes (2.79), on obtient :

$$\lambda'(\xi) = -\frac{5}{4}k \sum_j n_j \sqrt{\frac{2KT}{m_j}} a_{j1}(\xi) \quad (3.45)$$

3.4 Les intégrales de collision $\Omega^{(l,s)}$

Les coefficients de transport ont été exprimés en fonction des coefficients du développement de Sonine, qui sont obtenus par la solution du système d'équations (2.91).

On peut constater que les coefficients $t_{jm}^{(h,k)}(\xi)$ sont des combinaisons complexes des intégrales de crochet. Chapman et Cowling ont montré que ces intégrales peuvent être écrites comme des combinaisons des intégrales $\Omega^{(l,s)}$ [20].

Pour les collisions entre les molécules de type i et de type j , ces intégrales sont définies comme suit :

$$\Omega^{(l,s)} = \sqrt{\frac{2\pi KT}{\mu_{ij}}} \int_0^\infty \int_0^\infty e^{-\gamma_{ij}^2} \gamma_{ij}^{2s+3} (1 - \cos^l \chi) b \, db \, d\gamma_{ij} \quad (3.46)$$

avec,

μ_{ij} : masse réduite des espèces i et j .

γ_{ij} : vitesse initiale réduite.

χ : angle de deflexion.

b : paramètre d'impact.

3.5 Expressions des coefficients de transport en fonction des intégrales de collision $\Omega^{(l,s)}$

3.5.1 Coefficient de diffusion

Le coefficient de diffusion dans un mélange d'espèces peut être obtenu avec une très bonne approximation en considérant seulement un terme dans le développement de sonine ($\xi = 1$). D'après l'équation (2.96) les équations qui donnent les $c_{j0}^{(h,k)}$ sont donc :

$$\sum_j \tilde{Q}_{ij}^{00} c_{j0}^{(h,k)}(1) = R_{i0}^{(h,k)} \quad (3.47)$$

En fonction des $\Omega^{(l,s)}$ ces équations deviennent :

$$\sum_j c_{j0}^{(h,k)}(1) \sum_l \frac{n_l m_l}{(m_i + m_l) \sqrt{m_j}} [n_i m_i (\delta_{ij} - \delta_{jl}) - n_j m_j (1 - \delta_{il})] \Omega_{il}^{(1,1)} = -(\delta_{ih} - \delta_{ik}) \frac{3}{16} \sqrt{2KT} \quad (3.48)$$

Pour un mélange binaire (un mélange qui contient deux éléments), on obtient :

$$c_{j0}^{(h,k)}(1) = (\delta_{jh} - \delta_{jk}) \frac{3(m_i + m_j)}{16n_i \rho} \sqrt{\frac{2kT}{m_i}} \frac{1}{\Omega_{ij}^{(1,1)}} \quad (3.49)$$

Donc de l'équation (3.14), la première approximation pour le coefficient de diffusion binaire est :

$$\mathfrak{D}_{ij}(1) = \frac{3(m_i + m_j)}{16nm_i m_j} \frac{kT}{\Omega_{ij}^{(1,1)}} \quad (3.50)$$

3.5.2 Coefficient de diffusion thermique

Pour obtenir les coefficients de diffusion thermique, il est nécessaire d'évaluer la fonction A_i . Dans ce cas deux termes du développement polynomial de Sonine sont considérés ($\xi = 2$), l'équation (2.96) devient :

$$\sum_j \sum_{m'=0}^1 \tilde{Q}_{ij}^{mm'} a_{jm'}(2) = -R_{im} \quad (3.51)$$

Les $\tilde{Q}_{ij}^{mm'}$ en fonction des $\Omega^{(l,s)}$ sont :

$$\tilde{Q}_{ij}^{00} = 8 \sum_k \frac{n_k m_k}{\sqrt{m_i m_j} (m_i + m_k)} [n_i m_i (\delta_{ij} - \delta_{jk}) - n_j m_j (1 - \delta_{ik})] \Omega_{ik}^{(1,1)} \quad (3.52)$$

$$\tilde{Q}_{ij}^{01} = -8 \left(\frac{m_i}{m_j} \right)^{3/2} \sum_k \frac{n_i n_k m_k^2}{(m_i + m_k)^2} (\delta_{ij} - \delta_{jk}) \left[\Omega_{ik}^{(1,2)} - \frac{5}{2} \Omega_{ik}^{(1,1)} \right] \quad (3.53)$$

$$\tilde{Q}_{ij}^{10} = \frac{m_j}{m_i} \tilde{Q}_{ij}^{01} \quad (3.54)$$

$$\tilde{Q}_{ij}^{11} = 8 \left(\frac{m_i}{m_j} \right)^{3/2} \sum_k \frac{n_i n_k m_k^2}{(m_i + m_k)^3} \left[(\delta_{ij} - \delta_{jk}) \left[\frac{5}{4} (6m_j^2 + 5m_k^2) \Omega_{ik}^{(1,1)} - 5m_k^2 \Omega_{ik}^{(1,2)} + m_k^2 \Omega_{ik}^{(1,3)} \right] + (\delta_{ij} + \delta_{jk}) 2m_j m_k \Omega_{ik}^{(2,2)} \right] \quad (3.55)$$

et

$$R_{im} = \delta_{m1} \frac{15}{4} n_i \sqrt{2kT/m_i} \quad (3.56)$$

Les expressions dans (3.51) forment un système d'équations linéaires pour les coefficients a_{j0} et a_{j1} , qui peut être résolu par la loi de Cramer. De l'équation (3.15), on obtient l'expression pour le coefficient de diffusion thermique[20]

$$D_i^T(2) = n_i \sqrt{\frac{m_i kT}{2}} \begin{array}{c} \left| \begin{array}{cccccccc} \tilde{Q}_{11}^{00} & \tilde{Q}_{12}^{00} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{1\nu}^{00} & \tilde{Q}_{11}^{01} & \tilde{Q}_{12}^{01} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{1\nu}^{01} & 0 \\ \tilde{Q}_{21}^{01} & \tilde{Q}_{22}^{01} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{2\nu}^{01} & \tilde{Q}_{21}^{01} & \tilde{Q}_{22}^{01} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{2\nu}^{01} & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \tilde{Q}_{\nu 1}^{00} & \tilde{Q}_{\nu 2}^{00} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{\nu\nu}^{00} & \tilde{Q}_{\nu 1}^{01} & \tilde{Q}_{\nu 2}^{01} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{\nu\nu}^{01} & 0 \\ \tilde{Q}_{11}^{10} & \tilde{Q}_{12}^{10} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{1\nu}^{10} & \tilde{Q}_{11}^{11} & \tilde{Q}_{12}^{11} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{1\nu}^{11} & R_{11} \\ \tilde{Q}_{21}^{10} & \tilde{Q}_{22}^{10} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{2\nu}^{10} & \tilde{Q}_{21}^{11} & \tilde{Q}_{22}^{11} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{2\nu}^{11} & R_{21} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \tilde{Q}_{\nu 1}^{10} & \tilde{Q}_{\nu 2}^{10} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{\nu\nu}^{10} & \tilde{Q}_{\nu 1}^{11} & \tilde{Q}_{\nu 2}^{11} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{\nu\nu}^{11} & R_{\nu 1} \\ \delta_{i1} & \delta_{i2} & \cdot & \cdot & \delta_{i\nu} & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \end{array} \right| \\ \left| \begin{array}{ccccccc} \tilde{Q}_{11}^{00} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{1\nu}^{00} & \tilde{Q}_{11}^{01} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{1\nu}^{01} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \tilde{Q}_{\nu 1}^{00} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{\nu\nu}^{00} & \tilde{Q}_{\nu 1}^{01} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{\nu\nu}^{01} \\ \tilde{Q}_{11}^{10} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{1\nu}^{10} & \tilde{Q}_{11}^{11} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{1\nu}^{11} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \tilde{Q}_{\nu 1}^{10} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{\nu\nu}^{10} & \tilde{Q}_{\nu 1}^{11} & \cdot & \cdot & \tilde{Q}_{\nu\nu}^{11} \end{array} \right| \end{array} \quad (3.57)$$

3.5.3 Coefficient de viscosité

Pour un mélange de ν -espèces, d'après l'équation (3.25) la première approximation pour la viscosité est :

$$\eta(1) = \frac{1}{2} kT \sum_j n_j b_{j0}(1) \quad (3.58)$$

Les $b_{j0}(1)$ sont donc déterminés par ν équations (voir l'équation (2.96)) :

$$\sum_j \left(\frac{\check{Q}_{ij}^{00}}{R_{i0}} \right) b_{j0}(1) = -1 \quad i = 1, 2, 3, \dots, \nu \quad (3.59)$$

avec :

$$\check{Q}_{ij}^{00} = \sum_l n_i n_l \left\{ \delta_{ij} \left[\overleftrightarrow{W}_i; \overleftrightarrow{W}_i \right]_{il} + \delta_{jl} \left[\overleftrightarrow{W}_i; \overleftrightarrow{W}_l \right]_{il} \right\} \quad (3.60)$$

Dans ce cas \overleftrightarrow{W}_i et R_{i0} sont :

$$\overleftrightarrow{W}_i = \overrightarrow{W}_i \overrightarrow{W}_i - \frac{1}{3} W_i^2 \overrightarrow{U} \quad (3.61)$$

$$R_{i0} = \int 2(\overleftrightarrow{W}_i : \overleftrightarrow{W}_i) f_i^{[0]} d\overrightarrow{V}_i = -\frac{4}{3} \int W_i^4 f_i^{[0]} d\overrightarrow{V}_i = -5n_i \quad (3.62)$$

De l'équation (3.59) et par la méthode de Cramer on peut obtenir les $b_{j0}(1)$. Cependant la seule quantité qui apparaît dans l'expression du coefficient de viscosité est $\sum_j b_{j0}(1)$. Cela peut être écrit comme le rapport de deux déterminants, le premier dans le numérateur d'ordre $\nu + 1$ et le second dans le dénominateur d'ordre ν , ce qui nous permet d'obtenir [20] :

$$\eta(1) = - \frac{\begin{vmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdot & \cdot & H_{1\nu} & n_1/n \\ H_{21} & H_{22} & \cdot & \cdot & H_{2\nu} & n_2/n \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{\nu 1} & H_{\nu 2} & \cdot & \cdot & H_{\nu\nu} & n_\nu/n \\ n_1/n & n_2/n & \cdot & \cdot & n_\nu/n & 0 \end{vmatrix}}{|H_{ij}|} \quad (3.63)$$

avec

$$H_{ij} = -\frac{2n_i \check{Q}_{ij}^{00}}{n^2 k T R_{i0}} = \frac{2}{5kT} \sum_l \frac{n_i n_l}{n^2} \left\{ \delta_{ij} \left[\overleftrightarrow{W}_i; \overleftrightarrow{W}_i \right]_{il} + \delta_{jl} \left[\overleftrightarrow{W}_i; \overleftrightarrow{W}_l \right]_{il} \right\} \quad (3.64)$$

Les H_{ij} peuvent être écrits en fonction des $\Omega^{(l,s)}$:

$$H_{ij} = \frac{32}{15} \frac{n_i m_i}{n^2 m_j k T} \sum_l \frac{n_l m_l}{(m_i + m_l)^2} \left[\begin{array}{l} 5m_j (\delta_{ij} - \delta_{jl}) \Omega_{il}^{(1,1)} \\ + \frac{3}{2} (\delta_{ij} + \delta_{jl}) 2m_j m_k \Omega_{il}^{(2,2)} \end{array} \right] \quad (3.65)$$

L'équation (70) représente le coefficient de viscosité d'un mélange gazeux de ν espèce.

3.5.4 Coefficient de conductivité thermique

Habituellement l'expression du flux d'énergie est écrite en fonction des vitesses de diffusion et le gradient de température [20]. de l'équation (3.42) on trouve :

$$\vec{q} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial \vec{r}} + \frac{5}{2} kT \sum_i n_i \vec{V}_i + \frac{kT}{n} \sum_{i,j} \frac{n_i D_i^T}{m_i \mathfrak{D}_{ij}(1)} (\vec{V}_i - \vec{V}_j) \quad (3.66)$$

Dans cette expression :

$$\lambda = \lambda' - \frac{k}{2n} \sum_{i,j} \frac{n_i n_j}{\mathfrak{D}_{ij}(1)} \left[\frac{D_i^T}{n_i m_i} - \frac{D_j^T}{n_j m_j} \right] \quad (3.67)$$

La quantité λ' est exprimée en fonction des coefficients du développement de Sonine par (3.45) sur laquelle, on applique la règle de Kramer, on obtient donc :

$$\lambda'(2) = -\frac{75}{8} k^2 T \frac{\begin{vmatrix} q_{11}^{00} & \cdot & \cdot & q_{1\nu}^{00} & q_{11}^{01} & \cdot & \cdot & q_{1\nu}^{01} & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ q_{\nu 1}^{00} & \cdot & \cdot & q_{\nu\nu}^{00} & q_{\nu 1}^{01} & \cdot & \cdot & q_{\nu\nu}^{01} & 0 \\ q_{11}^{10} & \cdot & \cdot & q_{1\nu}^{10} & q_{11}^{11} & \cdot & \cdot & q_{1\nu}^{11} & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ q_{\nu 1}^{10} & \cdot & \cdot & q_{\nu\nu}^{10} & q_{\nu 1}^{11} & \cdot & \cdot & q_{\nu\nu}^{11} & 1 \\ 0 & \cdot & \cdot & 0 & 1 & \cdot & \cdot & 1 & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} q_{11}^{00} & \cdot & \cdot & q_{1\nu}^{00} & q_{11}^{01} & \cdot & \cdot & q_{1\nu}^{01} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ q_{\nu 1}^{00} & \cdot & \cdot & q_{\nu\nu}^{00} & q_{\nu 1}^{01} & \cdot & \cdot & q_{\nu\nu}^{01} \\ q_{11}^{10} & \cdot & \cdot & q_{1\nu}^{10} & q_{11}^{11} & \cdot & \cdot & q_{1\nu}^{11} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ q_{\nu 1}^{10} & \cdot & \cdot & q_{\nu\nu}^{10} & q_{\nu 1}^{11} & \cdot & \cdot & q_{\nu\nu}^{11} \end{vmatrix}} \quad (3.68)$$

avec :

$$q_{ij}^{mp} = \frac{\sqrt{2\pi m_i}}{kt} \check{Q}_{ij}^{mp} \quad (3.69)$$

3.5.5 Coefficient de conductivité électrique

Un gaz ionisé est caractérisé par la nécessité de la neutralité de charge dans l'ensemble du gaz. Si nous désignons par eZ_i , la charge d'une particule et si nous numérotions le ions de 2 à ν . Cette condition se traduit par :

$$\sum_{i=1}^{\mu} n_i Z_i = 0 \quad (3.70)$$

En présence d'un gradient de concentration, de pression ou de température, à cause de leur masse relativement petite, les électrons tendent à diffuser plus rapidement que les ions. Mais lorsque les électrons diffusent plus vite que les ions, il s'établit un champ électrique qui a pour effet de réduire la vitesse de diffusion des électrons et d'augmenter celle des ions. On atteint un état d'équilibre dans lequel la divergence du courant s'annule en tout point. Le courant total étant [21] :

$$\sum_{i=1}^{\nu} n_i (e Z_i) \vec{V}_i = e \sum_{i=1}^{\mu} n_i Z_i \vec{V}_i = e \sum_{i=1}^{\mu} Z_i \vec{g}_i \quad (3.71)$$

avec : $\vec{g}_i = n_i \vec{V}_i$

cette condition se traduit par $\vec{\nabla} \cdot e \sum_{i=1}^{\mu} Z_i \vec{g}_i = 0$ soit :

$$\vec{\nabla} \cdot \sum_{i=1}^{\mu} Z_i \vec{g}_i = 0 \quad (3.72)$$

On désigne l'électron par l'indice 1, les ions de charge Z_i par les indices 2 à μ et les particules neutres par les indices $\mu + 1$ à ν .

On suppose par ailleurs que la seule force externe est un champ électrique \vec{E} donc :

$$\vec{X}_i = e Z_i \vec{E} \quad (3.73)$$

L'équation eqref s'écrit alors [39] :

$$\vec{d}_i = \vec{\nabla} x_i + \left(x_i - \frac{\rho_i}{\rho}\right) \vec{\nabla} \ln p - \frac{\rho_i}{p\rho} \left(\frac{\rho e Z_i \vec{E}}{m_i} - \sum_{l=1}^{\mu} n_l e Z_l \vec{E} \right) \quad (3.74)$$

Or d'après (4.14) :

$$\sum_{l=1}^{\mu} n_l e Z_l \vec{E} = 0 \quad (3.75)$$

Donc :

$$\vec{d}_i = \vec{\nabla} x_i + \left(x_i - \frac{\rho_i}{\rho}\right) \vec{\nabla} \ln p - \frac{n_i Z_i e \vec{E}}{nkT} \quad (\text{pour } 1 \leq i \leq \mu) \quad (3.76)$$

$$\vec{d}_i = \vec{\nabla} x_i + \left(x_i - \frac{\rho_i}{\rho}\right) \vec{\nabla} \ln p - \frac{n_i Z_i e \vec{E}}{nkT} \quad (\text{pour } i > \mu \text{ car } Z_i = 0) \quad (3.77)$$

et d'après l'équation (3.4) nous avons :

$$\vec{g}_i = \frac{n^2}{\rho} \sum_{j=1}^{\nu} m_j D_{ij} \left\{ \vec{\nabla} x_j + \left(x_j - \frac{\rho_j}{\rho} \right) \vec{\nabla} \ln p - \frac{n_j Z_j e \vec{E}}{nkT} \right\} - \frac{D_i^T}{m_i} \vec{\nabla} \ln T \quad (3.78)$$

où $Z_j = 0$ pour $j > \mu$.

Considérons la composante \vec{j}_i de \vec{g}_i suivant \vec{E} :

$$\vec{j}_i = -\frac{n^2}{\rho} \sum_{j=1}^{\nu} m_j D_{ij} - \frac{n_j Z_j e \vec{E}}{nkT} = - \left(\frac{en}{\rho kT} \sum_{j=1}^{\nu} n_j m_j Z_i D_{ij} \right) \vec{E} \quad (3.79)$$

La conductivité électrique σ est défini par :

$$\sum_{i=1}^{\nu} e Z_i \vec{j}_i = \sigma \vec{E} \quad (3.80)$$

d'où :

$$\sigma - \frac{n^2}{\rho} \sum_{j=1}^{\nu} m_j D_{ij} - \frac{n_j Z_j e \vec{E}}{nkT} = - \left(\frac{en}{\rho kT} \sum_{j=1}^{\nu} n_j m_j Z_i D_{ij} \right) \quad (3.81)$$

Chapitre 4

Procédure de calcul et interprétation des résultats

Si on soumet un gaz à des contraintes telles qu'un gradient de concentration, un gradient de vitesse, un gradient de température ou un champ électrique, la réaction du milieu se traduit par l'apparition d'un courant de particules, d'une pression, d'un flux de chaleur ou d'un courant électrique.

Dans le cadre de la théorie cinétique des gaz, la réaction du milieu est supposée proportionnelle à l'excitation. Les facteurs de proportionnalité sont les coefficients de transport : coefficient de diffusion, viscosité, conductivité thermique et conductivité électrique.

L'objectif de ce chapitre est de calculer les coefficients de transport d'un plasma de polyamide 6-6 (abrégé en PA66) ou nylon à des pressions variant de 1 à 10 *atm* dans la gamme de température 5000 – 20000K.

Cette étude est appliquée aux plasmas issus de la vaporisation de matériaux thermoplastiques car les propriétés de transport ont été calculées pour mettre en évidence l'influence de la nature du matériau. Nous sommes intéressés particulièrement aux interactions arc-parois et donc au rôle joué par les vapeurs d'isolants sur les performances des appareils de coupure.

En effet, les appareils de coupure sont amenés à couper le courant en un intervalle de temps réduit. Lors de l'ouverture des contacts, il y a une formation d'un arc électrique, qui s'accompagne de l'évaporation du matériau constituant le boîtier du disjoncteur [1], d'où la formation d'un plasma formé essentiellement de vapeur d'isolant.

Le choix PA66, ayant comme formule chimique $C_{12}H_{22}O_2N_2$, a été guidé par le fait que ce matériau est couramment employé dans l'industrie d'appareillage de coupure.

Les fibres PA66 présentent une grande flexibilité car la molécule du polyamide 6,6 est elle-même flexible et peut s'orienter à chaque liaison [35]. Ces fibres ont aussi une haute résistance à la traction, à l'abrasion, à la chaleur et possèdent une bonne stabilité dimensionnelle. Ils sont aussi de bons isolants thermique et électrique, résistent au choc et à l'usure. Il s'agit de polymères

présentant un très bon compromis entre les caractéristiques mécaniques, thermiques et chimiques.

4.1 Expressions utilisées pour le calcul des coefficients de transport

Nous avons expliqué au chapitre précédent la méthode de Chapman-Enskog pour le calcul des coefficients de transport en fonction des coefficients du développement de Sonine. Devoto a développé des expressions théorique qui permettent de calculer les coefficients de transport des mélange gazeux à ν composants, dont l'approximation peut atteindre d'ordre 4.

4.1.1 Conductivité électrique

La conductivité électrique d'un gaz partiellement ionisé, à l'équilibre thermodynamique local (E.T.L), est développé par Devoto [29] à la troisième approximation de la méthode de Chapman-Enskog, En négligeant la contribution des ions au transport de courant. Elle est donnée par :

$$\sigma(3) = \frac{3e^2}{2} n_e^2 \sqrt{\frac{2\pi}{m_e kT}} \frac{\begin{vmatrix} q^{11} & q^{12} \\ q^{12} & q^{22} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} q^{00} & q^{01} & q^{02} \\ q^{01} & q^{11} & q^{12} \\ q^{02} & q^{12} & q^{22} \end{vmatrix}} \quad (4.1)$$

n_e et e sont la densité et charge électronique respectivement.

m_e : masse de l'électron.

Les paramètres q^{mp} sont fonctions des densités de toutes les espèces en présence (y compris les électrons) et les intégrales de collision $\overline{Q_{ij}^{(l,s)}}$ entre les électrons et les autres espèces chimiques [20] :

$$\begin{aligned} q^{00} &= 8 \sum_j n_1 n_j \overline{Q_{1j}^{(1,1)}} \\ q^{01} &= 8 \sum_j n_1 n_j \left[\frac{5}{2} \overline{Q_{1j}^{(1,1)}} - 3 \overline{Q_{1j}^{(1,2)}} \right] \\ q^{11} &= 8 \sqrt{2} n_1^2 \overline{Q_{1j}^{(2,2)}} + 8 \sum_j n_1 n_j \left[\frac{25}{4} \overline{Q_{1j}^{(1,1)}} - 15 \overline{Q_{1j}^{(1,2)}} - 12 \overline{Q_{1j}^{(1,3)}} \right] \\ q^{02} &= 8 \sum_j n_1 n_j \left[\frac{35}{8} \overline{Q_{1j}^{(1,1)}} - \frac{21}{2} \overline{Q_{1j}^{(1,2)}} + 6 \overline{Q_{1j}^{(1,3)}} \right] \\ q^{12} &= 8 \sqrt{2} n_1^2 \left[\frac{7}{4} \overline{Q_{1j}^{(2,2)}} - 2 \overline{Q_{1j}^{(2,3)}} \right] + 8 \sum_j n_1 n_j \left[\frac{175}{16} \overline{Q_{1j}^{(1,1)}} - \frac{315}{8} \overline{Q_{1j}^{(1,2)}} + 57 \overline{Q_{1j}^{(1,3)}} - 30 \overline{Q_{1j}^{(1,4)}} \right] \\ q^{22} &= 8 \sqrt{2} n_1^2 \left[\frac{77}{16} \overline{Q_{1j}^{(2,2)}} - 7 \overline{Q_{1j}^{(2,3)}} + 5 \overline{Q_{1j}^{(2,4)}} \right] + 8 \sum_j n_1 n_j \left[\frac{1225}{64} \overline{Q_{1j}^{(1,1)}} - \frac{735}{8} \overline{Q_{1j}^{(1,2)}} + \frac{399}{2} \overline{Q_{1j}^{(1,3)}} \right. \\ &\quad \left. - 210 \overline{Q_{1j}^{(1,4)}} + 90 \overline{Q_{1j}^{(1,5)}} \right] \end{aligned}$$

n_i : densité de l'espèce i (pour l'électron $i = 1$) et :

$$\overline{Q_{ij}}^{(l,s)} = \pi \overline{\Omega_{ij}}^{(l,s)} \quad (4.2)$$

4.1.2 Coefficient de viscosité

Dans le calcul de viscosité nous prenons en considération que les espèces lourdes. Cela est dû à la différence de masse entre les électrons et les espèces lourdes.

La viscosité s'écrit selon Hirschfelder et.al. [20] :

$$\eta(1) = \frac{\begin{vmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdot & \cdot & H_{1\nu} & x_1 \\ H_{21} & H_{22} & \cdot & \cdot & H_{2\nu} & x_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{\nu 1} & H_{\nu 2} & \cdot & \cdot & H_{\nu\nu} & x_\nu \\ x_1 & x_2 & \cdot & \cdot & x_\nu & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} H_{11} & H_{12} & \cdot & \cdot & H_{1\nu} \\ H_{21} & H_{22} & \cdot & \cdot & H_{2\nu} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ H_{\nu 1} & H_{\nu 2} & \cdot & \cdot & H_{\nu\nu} \end{vmatrix}} \quad (4.3)$$

avec les éléments H_{ij} peuvent être écrits en fonction des η_{ij} :

$$H_{ii} = \frac{x_i^2}{\eta_i} + \sum_{i=1, k \neq i}^{\nu} \frac{2x_i x_k}{\eta_{ik}} \frac{M_i M_k}{(M_i + M_k)^2} \left[\frac{5}{3A_{ik}^*} + \frac{M_k}{M_i} \right] \quad (4.4)$$

$$H_{ij} = \frac{2x_i x_j}{\eta_{ij}} + \frac{M_i M_j}{(M_i + M_j)^2} \left[\frac{5}{3A_{ij}^*} - 1 \right] \quad i \neq j \quad (4.5)$$

avec

$$A_{ij}^* = \frac{\overline{\Omega}_{i,j}^{(2,2)}}{\overline{\Omega}_{i,j}^{(1,1)}} \quad (4.6)$$

$$\eta_i = \frac{5}{16} \frac{1}{\overline{\Omega}_{i,j}^{(2,2)}} \sqrt{\frac{kT}{N_a \pi}} \sqrt{M_i} \quad (4.7)$$

$$\eta_{ij} = \frac{5}{16} \frac{1}{\overline{\Omega}_{i,j}^{(2,2)}} \sqrt{\frac{kT}{N_a \pi}} \sqrt{\frac{2M_i M_j}{M_i + M_j}} \quad (4.8)$$

M_i et x_i sont respectivement la masse molaire et la fraction molaire de l'espèce chimique i .
 N_a : nombre d'avogadro.

On a :

$$\overline{\Omega}_{i,j}^{(l,s)} = \sigma^2 \frac{\Omega_{i,j}^{(l,s)}}{[\Omega_{i,j}^{(l,s)}]_{sph}} \quad (4.9)$$

$[\Omega_{i,j}^{(l,s)}]_{sph}$ est l'intégrale de collision associée à l'interaction entre les espèces i et j dans le modèle des sphères rigides élastique de diamètre σ [20].

4.1.3 Coefficient de conductivité thermique

Dans le chapitre 3 nous n'avons considéré que le cas d'un mélange de gaz monoatomique ne réagissant pas entre eux, et nous n'avons pas tenu compte des degrés interne de liberté, par conséquent l'expression (3.68) exprime la conductivité thermique de translation.

La conductivité thermique totale est ainsi considérée comme étant la somme de trois contribution [3] :

$$\lambda = \lambda_{tr} + \lambda_{int} + \lambda_r \quad (4.10)$$

avec :

λ_{tr} : conductivité thermique de translation

λ_{int} : conductivité thermique interne

λ_r : conductivité thermique de réaction

Le coefficients de conductivité thermique de translation la somme deux termes, l'un dû aux électrons et l'autre aux espèces lourdes :

$$\lambda_{tr} = \lambda_{tr}^e(3) + \lambda_{tr}^h(2) \quad (4.11)$$

En effet $\lambda_{tr}^e(3)$ correspondant aux électrons est établi jusqu'au deuxième ordre d'approximation du développement de Sonine. Par contre $\lambda_{tr}^h(2)$ correspondant aux espèces lourdes a atteint le niveau trois d'approximation.

La conductivité thermique de translation des électrons est ainsi donnée par Devoto [29]

$$\lambda_{tr}^e(3) = \frac{75n_e^2 K}{8} \left(\frac{2\pi kT}{m_e} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{q^{11} - (q^{12})^2 / q^{22}} \quad (4.12)$$

Les paramètres q^{11} , q^{12} , q^{22} sont données au paragraphe (4.1.1).

Quand à la conductivité thermique de translation des espèces lourdes, elle s'exprime comme suit :

$$\lambda_{tr}^h(2) = 4 \frac{\begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} & \cdot & \cdot & L_{1\nu} & x_1 \\ L_{21} & L_{22} & \cdot & \cdot & L_{2\nu} & x_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_{\nu 1} & L_{\nu 2} & \cdot & \cdot & L_{\nu\nu} & x_\nu \\ x_1 & x_2 & \cdot & \cdot & x_\nu & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} L_{11} & L_{12} & \cdot & \cdot & L_{1\nu} \\ L_{21} & L_{22} & \cdot & \cdot & L_{2\nu} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ L_{\nu 1} & L_{\nu 2} & \cdot & \cdot & L_{\nu\nu} \end{vmatrix}} \quad (4.13)$$

avec :

$$L_{ij} = \frac{2x_i x_j M_i M_j}{(M_i + M_j)^2 A_{ij}^* k_{ij}} \left(\frac{55}{4} - 3B_{ij}^* - 4A_{ij}^* \right) \quad i \neq j \quad (4.14)$$

$$L_{ii} = -4 \frac{(x_i^2)}{k_{ii}} - \sum_{k \neq i} \frac{2x_i x_j \left(\frac{15}{2} M_i^2 + \frac{25}{4} M_k^2 - 3B_{ij}^* + 4A_{ij}^* M_i M_k \right)}{(M_i + M_j)^2 A_{ij}^* k_{ik}} \quad (4.15)$$

$$k_{ij} = \frac{75}{64} k^{3/2} \sqrt{\frac{N_a T}{\pi}} \sqrt{\frac{M_i + M_j}{2M_i M_j}} \frac{1}{\bar{\Omega}_{i,j}^{(2,2)}}$$

$$A_{ik}^* = \frac{\bar{\Omega}_{i,k}^{(2,2)}}{\bar{\Omega}_{i,k}^{(1,1)}}$$

$$B_{ik}^* = \frac{5\bar{\Omega}_{i,k}^{(1,2)} - 4\bar{\Omega}_{i,k}^{(1,3)}}{\bar{\Omega}_{i,k}^{(1,1)}}$$

Pour les coefficients de conductivité thermique interne, nous introduisant le terme correctif d'Eucken λ_{int} pour chaque espèce i . Ce terme tient compte des échanges d'énergie entre les degrés interne de liberté. [21][27] :

$$\lambda_{int} = \sum_{i=1}^N \lambda_{int_i} \left(\sum_{i=1}^N \frac{D_{ii}(1)x_j}{D_{ij}(1)x_i} \right)^{-1} \quad (4.16)$$

avec :

$$\lambda_{int_i} = \frac{PD_{ii}(1)}{T} \left(\frac{C_{pi}}{R} - \frac{5}{2} \right) \quad (4.17)$$

$D_{ii} = D_{ii}(1)$ et $D_{ij} = D_{ij}(1)$: coefficients de diffusion binaires (c'est à dire relatifs à des mélanges comprenant deux éléments) pris à la première approximation ($\xi = 1$).

C_{pi} : la chaleur spécifique interne de l'espèce i à pression P constante.

Le plasma considéré est le siège d'un certain nombre de réactions chimiques. Ces réactions engendrent des gradients de concentration entraînant une diffusion qui crée un transport global d'énergie, d'où une modification de la conductivité thermique. Ce qui nous permet alors d'introduire la conductivité thermique de réaction. Ce coefficient est déterminé en utilisant la méthode de Bulter et Brokaw [31].

- On considère un mélange gazeux de ν éléments dans lequel plusieurs réactions chimiques peuvent avoir lieu simultanément.
- Les réactions sont écrites de la façon suivante :

$$X^i = \sum_j^{\nu} a_{ij} X^j \quad i = 1, \dots, \mu \quad (4.18)$$

avec :

X_i : composant indépendant.

X_j : composants entrant dans la réaction.

a_{ij} : coefficient stoechiométrique de l'espèce j dans la réaction i .

La conductivité thermique de réaction au second ordre d'approximation est écrite comme suit [27] :

$$\lambda_r(2) = 4 \frac{\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdot & \cdot & A_{1\mu} & \Delta H_1 \\ A_{21} & A_{22} & \cdot & \cdot & A_{2\mu} & \Delta H_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ A_{\mu 1} & A_{\mu 2} & \cdot & \cdot & A_{\mu\mu} & \Delta H_{\mu} \\ \Delta H_1 & \Delta H_2 & \cdot & \cdot & \Delta H_{\mu} & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdot & \cdot & A_{1\mu} \\ A_{21} & A_{22} & \cdot & \cdot & A_{2\mu} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ A_{\mu 1} & A_{\mu 2} & \cdot & \cdot & A_{\mu\mu} \end{vmatrix}} \quad (4.19)$$

avec :

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^{\nu+1} \sum_{l=k+1}^{\nu} \frac{RT}{PD_{kl}(1)} x_k x_l \left(\frac{a_{ik}}{a_k} - \frac{a_{il}}{a_l} \right) \left(\frac{a_{jk}}{a_k} - \frac{a_{jl}}{a_l} \right) \quad (4.20)$$

et :

$$\Delta H_i = \sum_{j=1}^{\nu} a_{ij} H_j - H_i \quad (4.21)$$

ΔH_i est la variation d'enthalpie due à la i ème réaction.

R est la constante des gaz parfaits.

P : la pression.

4.2 Données de base utilisés dans le calcul

Une étape importante et non négligeable de ce travail consiste à trouver les données de base nécessaire au code de calcul développé.

4.2.1 Fractions molaires x_i des espèces en fonction de la température

La détermination des coefficients de transport nécessite la connaissance de la composition d'équilibre du plasma. Le calcul de la composition à été réalisé au sein du laboratoire de physique et chimie quantique de Tizi Ouzou (*LPCQ*) pour des pression allant de 1 *atm* à 10 *atm*, dans la gamme de température 5000 – 25000K, en supposant que le plasma est en équilibre thermodynamique local (*ETL*) figure (4.1).

Dans notre calcul, 20 espèces ont été prises en compte : $e, H, H^+, C, C^+, O, O^+, N, N^+, N^{++}, H_2, C_2, NO, NH, OH, CH, CO, CO^+, C_3, C_2H$

Les valeurs des fractions molaires pour différentes valeurs de pression en fonction de la température sont calculées au sein de notre équipe [36].

4.2.2 Concentrations des espèces en fonction de la température

Pour une température et une pression données, si on considère un volume du gaz de 1cm^3 , la relation des gaz parfaits nous permet de calculer le nombre de mole par centimètre cube :

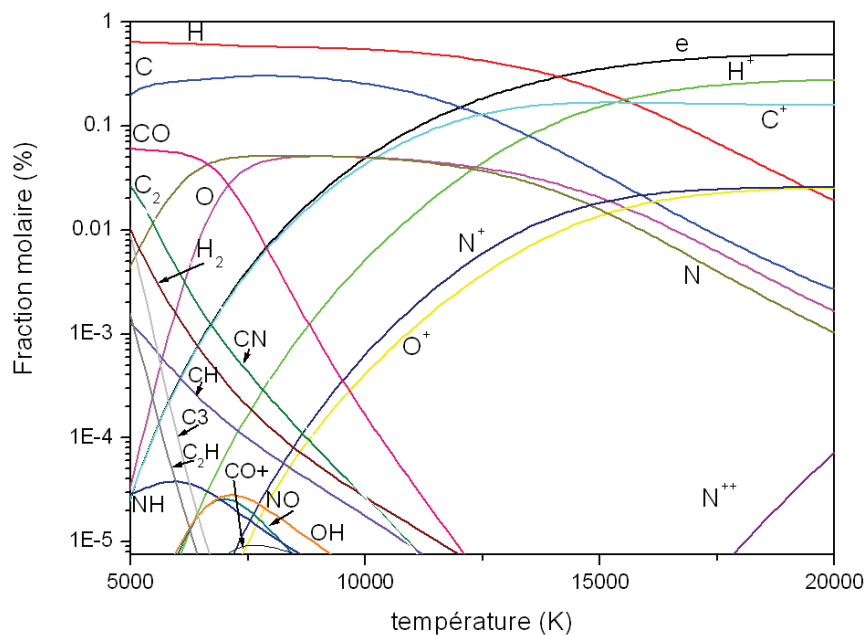


FIG. 4.1 – Fractions molaires des différentes espèces en fonction de la température pour 100% PA66

$$N = \frac{PV}{RT} \quad (4.22)$$

et partir des valeurs des fractions molaires calculées précédemment nous pouvons calculer les valeurs des concentrations de chaque espèce en fonction de la température :

$$n_i = \frac{x_i}{N} \quad (4.23)$$

4.2.3 Intégrales de collision

Les interactions entre deux particules i et j sont caractérisées par les intégrales de collision $\Omega_{i,j}^{(l,s)}$ qui dépendent de la forme du potentiel d'interaction des deux particules i et j où l et s sont des entiers dépendant du nombre de termes dans le développement du polynôme de Sonine.

Dans notre calcul nous avons besoin des intégrales de collision pour : $\begin{cases} l=1 \text{ et } s=2, 3, 4, 5 \\ l=2 \text{ et } s=2, 4 \end{cases}$

Toutes les valeurs de $\Omega_{i,j}^{(2,2)}$ sont calculées en utilisant le logiciel T&Twinner [18].

Les valeurs de $\Omega_{i,j}^{(1,1)}$ correspondant aux espèces : C_2 , C_3 , O_2 , CO et CO^+ sont calculées en utilisant les deux relations suivante :

1. Quand x est l'espèce chimique mono-atomique et x_2 est l'espèce chimique diatomique :

$$\Omega_{1,x_2}^{(1,1)} = \pi \sqrt[2]{2 \left(\frac{\Omega_{1,x}^{(1,1)}}{\pi} \right)^{1.5}} \quad (4.24)$$

2. Quand x est l'espèce chimique mono-atomique et x_3 est l'espèce chimique tri-tomique :

$$\Omega_{1,x_3}^{(1,1)} = \pi \sqrt[2]{3 \left(\frac{\Omega_{1,x}^{(1,1)}}{\pi} \right)^{1.5}} \quad (4.25)$$

Les valeurs de $\Omega_{i,j}^{(1,1)}$ des autres espèces sont également calculées en utilisant le même logiciel.

Le calcul de la conductivité électrique et la conductivité thermique de translation des électrons nécessite le calcul des paramètres q^{mp} qui sont fonction des intégrales de collision.

Les valeurs de $\Omega_{i,j}^{(1,s)}$, $\Omega_{i,j}^{(2,s)}$ (avec $s \geq 2$) sont déterminées en utilisant la relation de récurrence sur s établie par Hirschfelder et al [20].

$$\Omega_{i,j}^{(l,s+1)} = \Omega_{i,j}^{(l,s)} + \frac{T}{s+2} \frac{\partial \Omega_{i,j}^{(l,s)}}{\partial T} \quad (4.26)$$

Les 14 réactions indépendantes prises en compte lors du calcul du coefficient de conductivité thermique de réaction sont :

Réactions de dissociation	Réaction d'ionisation
$H_2 \rightarrow 2H$	$H \rightarrow H^+ + e$
$C_2 \rightarrow 2C$	$C \rightarrow C^+ + e$
$NO \rightarrow N + O$	$O \rightarrow O^+ + e$
$NH \rightarrow N + H$	$N \rightarrow N^+ + e$
$OH \rightarrow O + H$	$N^+ \rightarrow N^{++} + e$
$CH \rightarrow C + H$	
$CO \rightarrow C + O$	
$C_3 \rightarrow 3C$	
$C_2H \rightarrow 2C + H$	

4.3 Algorithme de calcul

Pour organiser et simplifier les calculs nous avons réalisé trois programmes exprimés en langage Fortran. Les algorithmes de ces calculs sont schématisés sur trois tableaux qui suivent.

Conductivité électrique

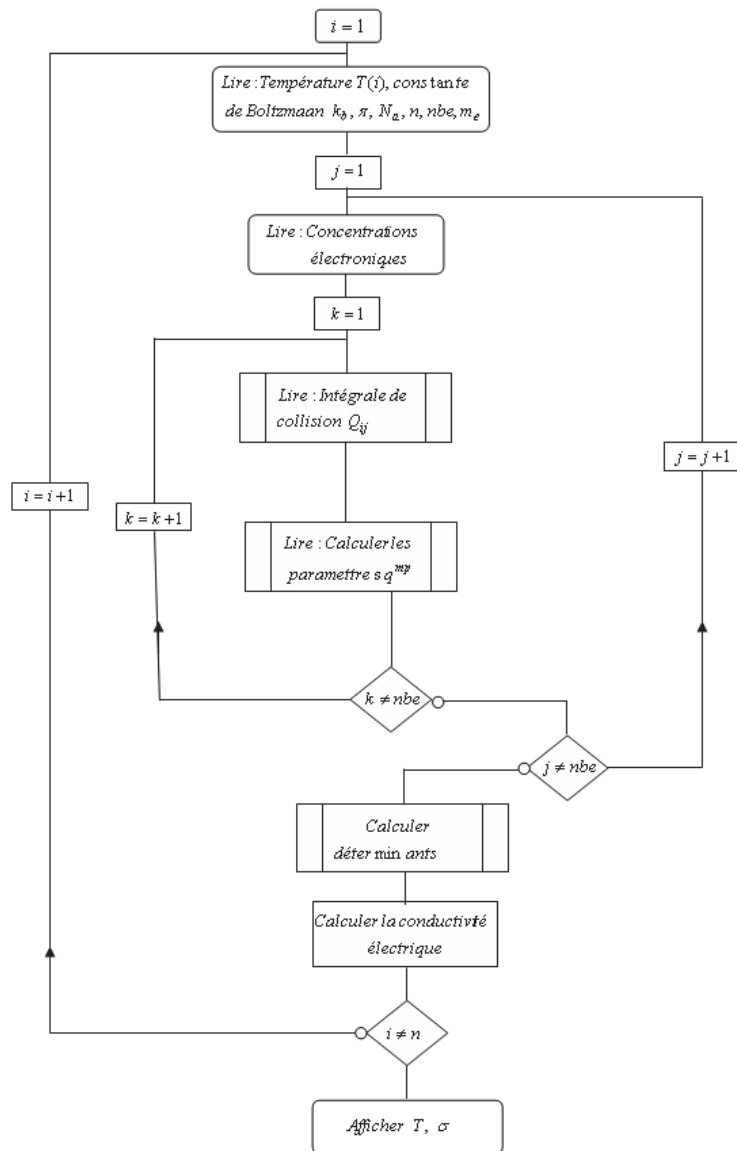


FIG. 4.2 – Organigramme de calcul de la conductivité électrique

Coefficient de viscosité

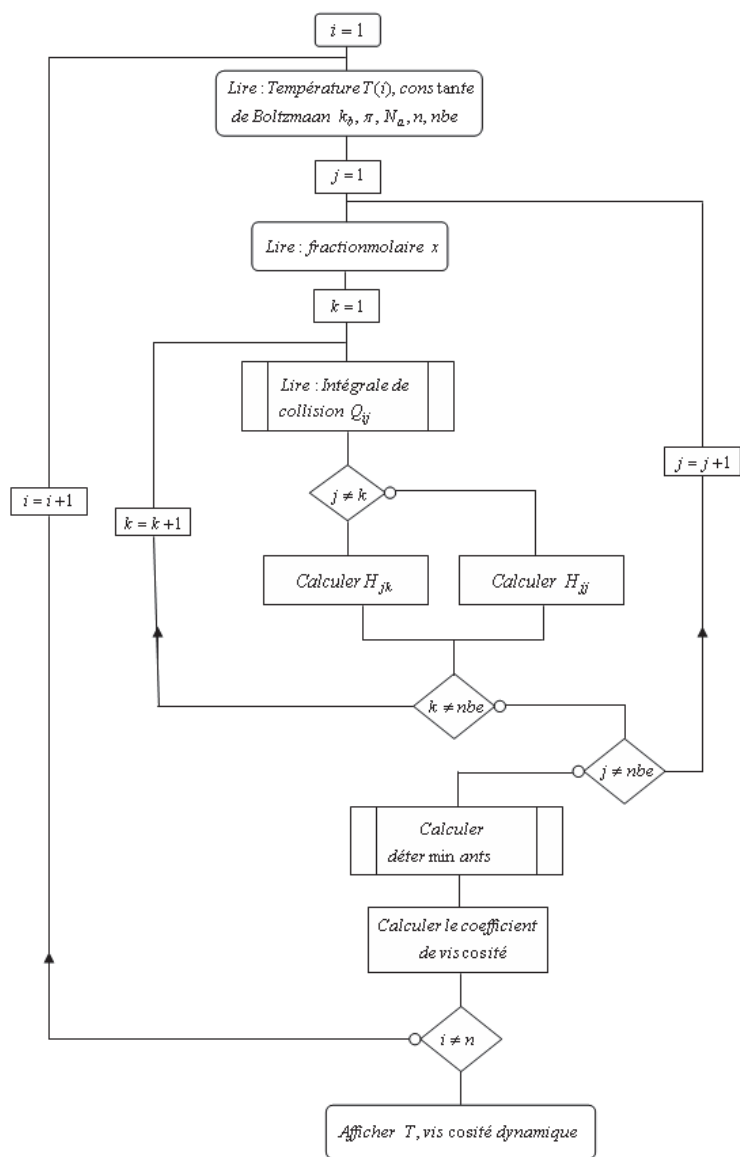


FIG. 4.3 – Organigramme de calcul de la viscosité dynamique

Conductivité thermique

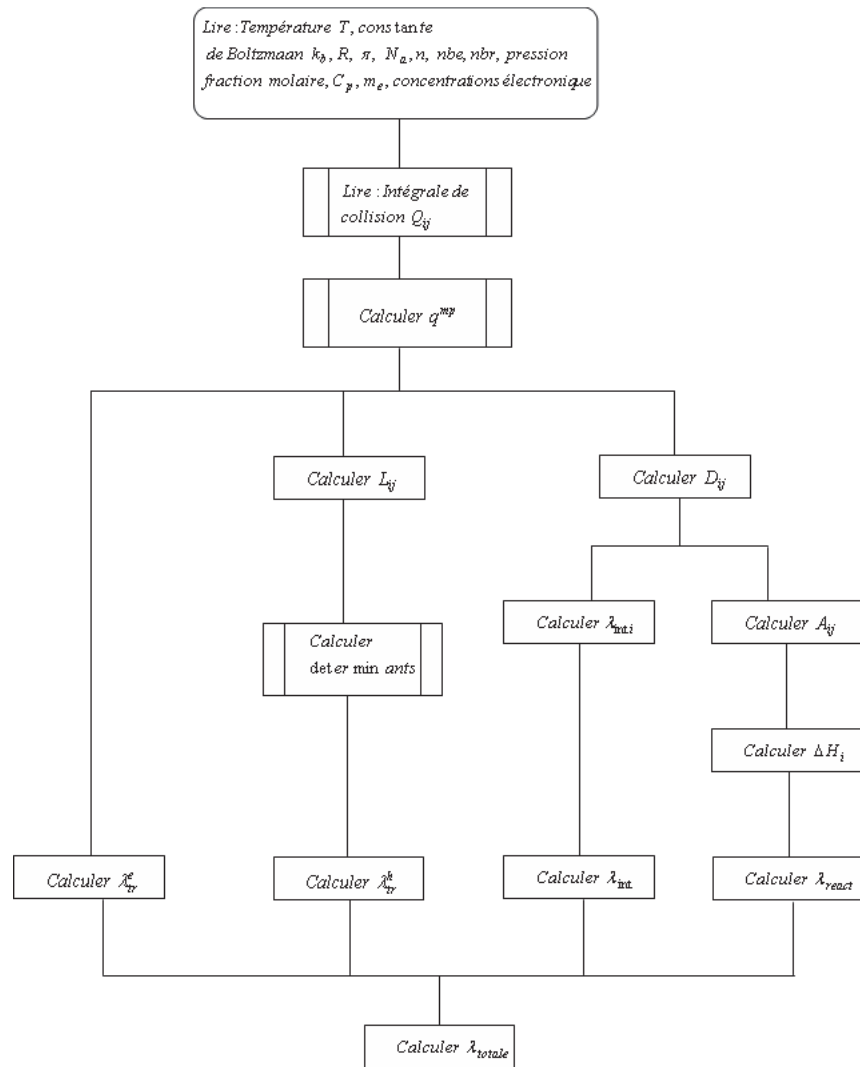


FIG. 4.4 – Organigramme de calcul de la conductivité thermique

4.4 Résultats et discussions

En première étape, nous avons calculé les coefficients de transport en fonction de la température pour un milieu formé exclusivement des vapeurs organiques issues de l'érosion du matériau des parois; c'est à dire 100% PA66 à pression $P = 1 \text{ atm}$. Ensuite nous avons étudié l'influence de la pression sur leurs comportements et enfin, nous avons effectué le calcul de la conductivité électrique en fonction de la température à pression atmosphérique pour un mélange de (PA66-air) pour différents pourcentages de PA66.

4.4.1 Evolution des coefficients de transport en fonction de la température pour une pression de 1 atm

Conductivité électrique

La conductivité électrique mesure la capacité d'un plasma à conduire le courant et ne tient compte que de la contribution des électrons. Cette approximation se justifie par une densité majoritaire d'électrons dont la mobilité reste toujours supérieure à celle des ions.

La conductivité électrique de notre plasma de vapeur est élevée figure (4.5). Ceci est lié à la faible valeur du potentiel de la première ionisation de l'atome de carbone par rapport à celle des autres particules neutres [34]. La conductivité électronique ne cesse d'augmenter en fonction de la température et cela peut s'expliquer du fait de l'augmentation de la densité électronique qui est due à l'accroissement de l'ionisation des espèces chimiques en fonction de la température.

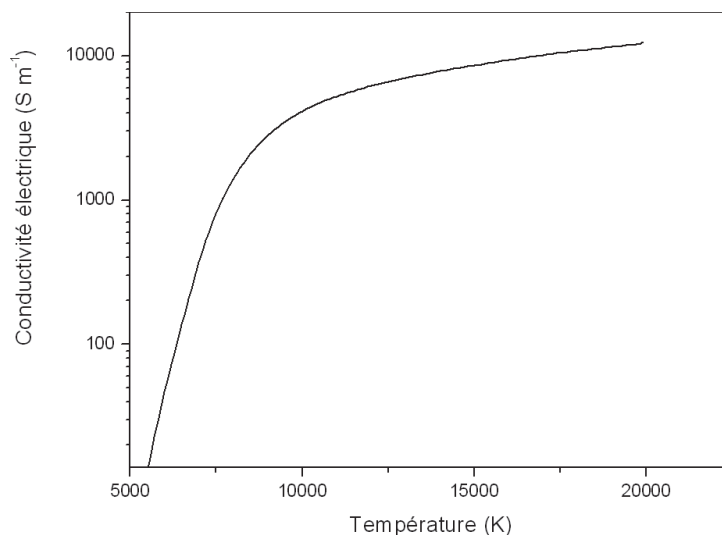


FIG. 4.5 – Conductivité électrique en fonction de la température pour une pression de 1 atm

Viscosité dynamique

Dans le cas d'un plasma d'isolant comme dans le cas du PA66 ($C_{12}H_{22}O_2N_2$), le caractère visqueux est peut être dû à la présence de l'atome d'oxygène et d'autres espèces qui contiennent

de l'oxygène telles que les molécules CO et NO [34].

On constate que le maximum de viscosité correspond à une température située au tour de $10000K$ figure (4.6). Au-delà de cette zone, on observe une décroissance rapide liée à la disparition progressive des particules neutre (molécules, puis atomes).

De même, d'après les relations (4.7) et (4.8), celle-ci varie suivant la racine du produit de la température avec la masse et inversement proportionnel à $\Omega_{i,j}^{(2,2)}$ ce qui donne un rôle primordial aux sections efficaces de quantité de mouvement dans le comportement de η .

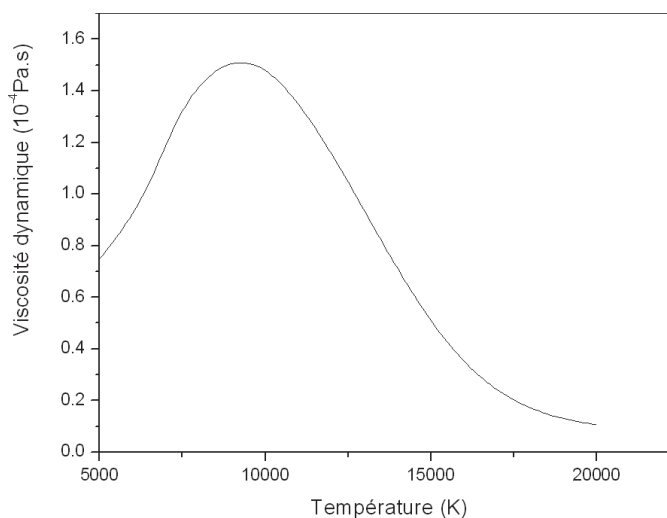


FIG. 4.6 – Variation de la viscosité en fonction de la température pour une pression de 1 atm

Lorsque la température augmente, la viscosité du plasma pour des températures ($T < 10000$) est dominée par les interactions neutre-neutre puis par des interaction ion-ion lorsque ($T > 10000$). Dans cette dernière zone de température, le taux d'ionisation augmente rapidement en fonction de la température. Quand les ions deviennent majoritaires dans le plasma, la viscosité décroît avec l'accroissement de la température. Cette chute s'explique non seulement par la diminution des termes de diffusion binaire proportionnels à $\Omega_{i,j}^{(2,2)}$ mais aussi par des interactions se faisant de plus en plus entre particules chargées (forces coulombiennes) dont les valeurs sont nettement plus élevées. Donc la position du pic marque la limite entre la viscosité dominée par les interactions neutre-neutre et celle dominée par les interactions ion-ion.

Conductivité thermique

L'influence de l'ionisation des atomes C , H , O , N issus du $C_{12}H_{22}O_2N_2$, apparaît pour des températures comprises entre 12000 et $16000K$ ($T_C \approx 12500$, $T_N \approx 14500$, $T_H \approx 15500$, $T_O \approx 15500$) [34]. Dans cette gamme de température, la conductivité thermique est étroitement liée (par le biais de sa composante de réaction λ_{reac}) aux intégrales de collision correspondant aux interactions $C - C^+$, $H - H^+$, $O - O^+$, $N - N^+$.

Le pic de la conductivité thermique totale observé à $7000K$ correspond à la dissociation des

molécule CO et N_2 . Le pics dus à la dissociation des autres molécules diatomiques issus du plasma $C_{12}H_{22}O_2N_2$ se situent à des température inférieures à 5000.

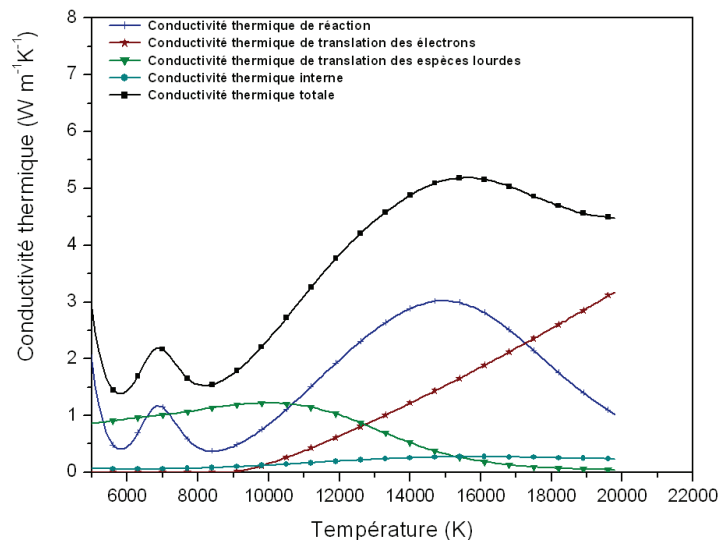


FIG. 4.7 – conductivité thermique en fonction de la température pour une pression de 1 atm

C'est la conductivité thermique de réaction qui constitue la principale composante de la conductivité thermique totale comme on peut le constater à la figure (4.7). Aux basse température, c'est-à-dire tant que le degré d'ionisation est faible, la conductivité thermique figure est due essentiellement aux différentes réactions chimiques et aux translations des particules lourdes. Au fur et à mesure que la température augmente, les termes relatifs aux conductivités thermiques de translation due eux électrons et de réaction deviennent prépondérants. Au enivrant de 20000K, la conductivité thermique est due en majeure partie à la conductivité thermique de translation électronique λ_{tr}^e . Dans cette zone le plasma est complètement ionisé et la conductivité thermique devient alors indépendante de la nature du gaz. Quand à la conductivité thermique interne λ_{int} , sa contribution à la valeur de la conductivité thermique totale est négligeable dans tout le domaine de température.

4.5 Validation du code de calcul

Pour valider notre code de calcul, la comparaisons des résultats obtenus des coefficients de transport avec d'autres travaux ont été faites.

4.5.1 Conductivité électrique

La figure nous permet de comparer nos résultats de la conductivité électrique en fonction de la température avec ceux obtenu par Abbaoui ref. On peut constater pour le cas du PA66, les deux courbes sont

4.5.2 Influence de la pression

La figure (4.8) présente l'influence de la pression sur la conductivité électrique. Quand la pression augmente, la densité électronique est plus basse à des température inférieurs à $15000K$. Le plasma devient moins conducteur. Ceci est lié à la diminution importante du taux d'ionisation avec la pression, dans cette zone de température, car l'élévation de la pression entraîne une augmentation des concentrations des espèces neutre (notamment moléculaire) plus rapide que celles de la densité électronique, conduisant ainsi à une diminution de la conductivité électrique.

A partir de $15000K$, on observe que les valeurs de la conductivité électrique coïncident pour toutes les valeurs de pression. Cela est du au fait que le plasma est fortement ionisé quelque soit la pression, dans cette zone on aboutit à des valeurs élevées de la conductivité électrique.

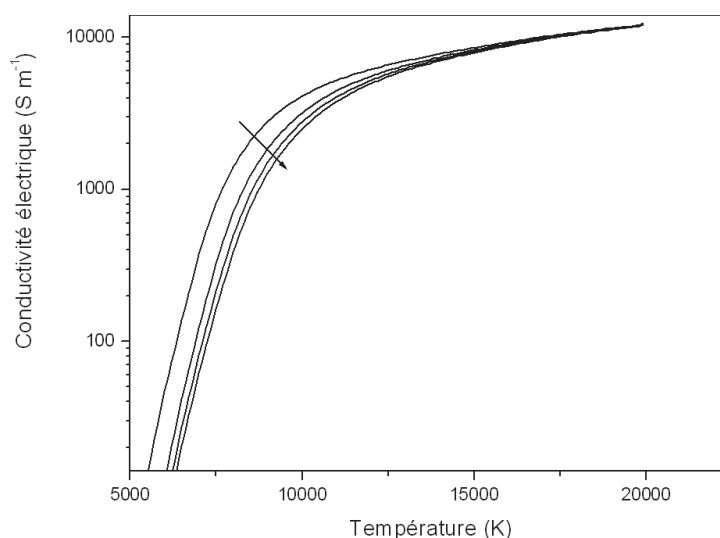


FIG. 4.8 – Variation de la conductivité électrique en fonction de la température pour des pressions de 1,3,7,10 atm

Nous pouvons constater que quand la pression augmente le maximum de viscosité augmente et se déplace vers les température les plus élevées. Ceci est lié au déplacement des équilibre chimique

avec la pression. En effet, la disparition des particules lourdes à lieu à des températures d'autant plus élevées que la pression est plus importante. On note également, à température égale, la une élévation de la valeur de μ viscosité avec la pression. Ceci se traduit par l'énergie de dissociation qui augmente quand la pression augmente c'est à dire à la même température, on à plus de molécules lourdes quand la pression est plus élevée.

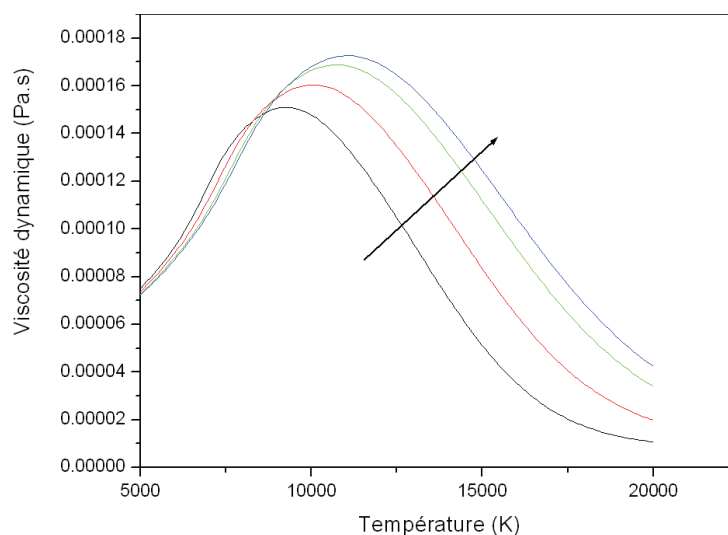


FIG. 4.9 – Variation de la viscosité en fonction de la température pour des pression de de 1,3,7,10 atm

Lorsque la pression augmente, les pics de la conductivité thermique se déplace vers les température élevés figure (4.10). La translation des maxima est liées aux déplacement des équilibres chimiques d'où une translation de la composante de réaction λ_{react} . Cette translation des pics d'ionisation et de dissociation d'accompagne d'une augmentation de la valeur de la conductivité thermique totale due à un accroissement de la valeur de la conductivité thermique de translation λ_{tr} .

4.5.3 Conductivité électrique et capacité d'interruption d'un disjoncteur

La figure représente les valeurs de la conductivité électrique pour différents mélange d'air et de PA66.

Les plasmas de vapeurs d'isolants (PA-66) ayant de fort pourcentage de carbone, sont caractérisés par une densité électronique élevée, surtout à basse température car la population électronique est essentiellement due à l'ionisation de l'atome de carbone C Figure (4.1). Ceci est lié à la faible valeur de l'énergie d'ionisation de C , comparativement à celles des autres particules monoatomiques. Pour des températures supérieures à $15000K$, c'est l'ionisation des atomes de H qui constitue la part la plus importante de la densité électroniques du plasma. La contribution

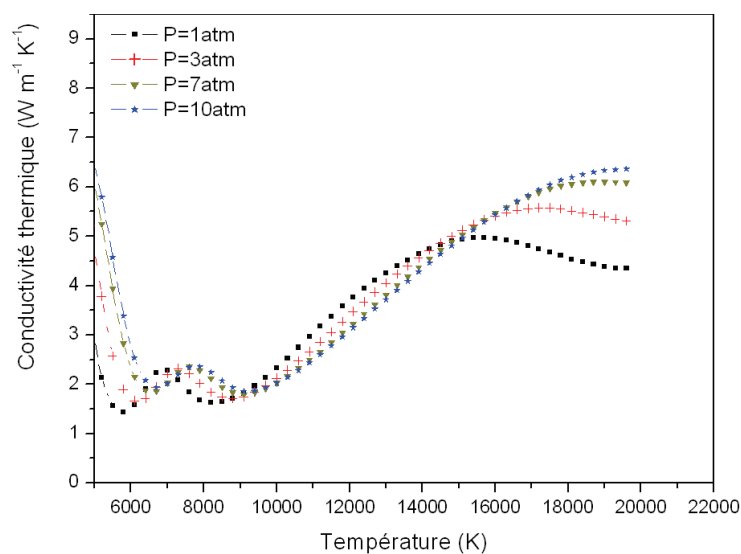


FIG. 4.10 – Variation de la conductivité thermique en fonction de la température pour des pressions de 1,3,7,10 atm

à la densité électronique des particules ionisées deux fois n'est appréciable qu'aux très hautes températures.

Pour ces hautes températures, les divers plasmas avec différent pourcentage de PA6-6 présentent la même conductivité électrique Figure (4.11). A ces températures, tous ces plasmas sont presque totalement ionisés et présentent la même densité électronique, la conductivité électrique qui est proportionnel à la densité électronique devient alors indépendante de la nature du gaz considéré.

Pour le PA6-6, la conductivité électrique moins importante par rapport à un plasma d'air figure (4.11). La diminution de la conductivité électrique entraîne une baisse de la conductance du plasma qui favorise l'extinction de l'arc et diminue la probabilité de re-claquage [37].

Ainsi du point de vue du fonctionnement d'un disjoncteur, les plasmas d'isolants possèdent de meilleurs caractéristiques que ceux de l'air, à savoir une mauvaise conductivité électrique à basse température et très bons conducteurs à hautes températures. En effet, et au vu des résultats obtenus, la conductivité électrique du PA6-6 est plus faible que celle de l'air à basse température, cela est du à la présence des molécules CO entraîne une diminution de la concentration de C source potentiel d'électrons.

Ces résultats confirment les caractéristiques électriques (courant, tension et champ électrique) obtenues expérimentalement par Cheminat [38] sur des arcs électriques en presences d'isolants (exemple PA6-6).

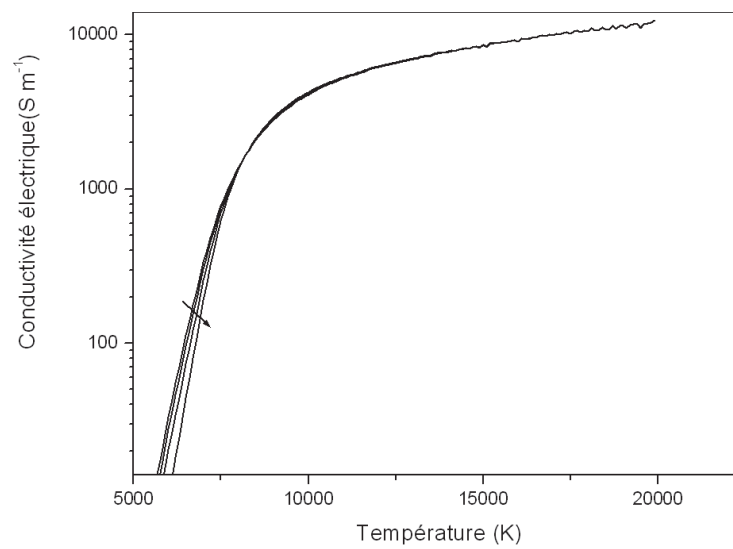


FIG. 4.11 – Variation de la conductivité thermique en fonction de la température pour des pressions de 1,3,7,10 atm

Conclusion

Les propriétés de transport sont calculées à l'aide d'expressions déduites de la théorie de Chapman-Enskog. Les valeurs des coefficients de transport dépendent étroitement de celles des intégrales de collision correspondant aux différentes interactions présentes dans le plasma.

Une étape importante et non négligeable de ce travail consiste à trouver les données de base pour la réalisation du code de calcul des coefficients de transport, comme les intégrales de collision $Q_{ij}^{(l,s)}$ pour $l = 1, 2$ et $s = 1, 2, 3, 4$, et 5.

Les résultats ont montré que la conductivité électrique ne cesse d'augmenter avec la température. Cela est dû à l'augmentation de la densité électronique qui provient de l'ionisation des espèces chimique comme H , C , N , O et CO .

La viscosité dynamique présente un maximum aux environs de $10000K$ qui représente la transition d'un gaz neutre vers un gaz totalement ionisé. Pour $T > 10000$ figure(4.6) les interactions entre particules chargées tendent à diminuer la viscosité.

Pour la conductivité thermique, on observe les différents processus de dissociation, notamment à basse température (autour de $70000K$), à cette température on observe figure(4.1) la dissociation des molécules H_2 , C_2 , CH , CN et NH et la translation des espèces lourdes. A des température plus élevées aux environs de $15000K$, la conductivité thermique dépend essentiellement des différentes réactions d'ionisation et de la translation des électrons.

Quand à l'influence de la pression, elle se traduit par une translation des caractéristiques du plasma vers les température élevées.

La présence de vapeurs d'isolant dans la chambre de coupure d'un disjoncteur améliore paradoxalement ses mêmes performances car un plasma de $PA66$ s'est révélé comme étant un mauvais conducteurs à basse température et une bonne conductivité thermique par l'intermédiaire de sa composante de réaction. Cette dernière a un lien étroit avec la constante de temps d'extinction de l'arc. Ces résultats confirment celle trouvés pour un plasma d'isolant $PA66$. Ceci laisse penser à une amélioration possible des appareils de coupure, avec un choix judicieux de la nature du matériaux d'isolant. Mes ces résultats à eux seuls ne peuvent pas constituer un critère de choix d'un isolant. D'autres paramètres doivent être pris en considération tel que la rigidité dialectique, résistance mécanique, inflammabilité, toxicité...etc.

Les valeurs obtenues constituent, par ailleurs, des données utilisables dans la modélisation des décharges d'arcs à parois ablatives.

Bibliographie

- [1] D. R. Airey, R. E. Kinsinger , P. H. Richards et J. D. Swift 1976 IEEE Trans. Power Appar.S yst. PAS-95 1-13.
- [2] D. R. Airey, R. E. Kinsinger , P. H. Richards et J. D. Swift 1976 IEEE Trans. Power Appar.S yst. PAS-95 1-13
- [3] M. Abbaoui, B. Cheminat, *Determination of the Characteristics of an Electric Arc Plasma Contaminated by Vapors From Insulators*, IEEE. Trans. Plasma Sci. 19, 1-8 (1991).
- [4] L. Reynard, *Modélisation tridimensionnelle de l'amorçage de l'arc électrique dans un disjoncteur basse-tension*, Thèse de l'école centrale de Lyon, 2006.
- [5] P.Kovitia *Thermodynamic and transport properties of ablated vapors of PTFE, alumine, perpeex, and PVC in the temperature range 5000-30000K*, IEEE Trans Plasma Sci 12, 38-42 (1987).
- [6] P.Kovitia *Ablation-Stabilized arcs in nylon and boric acid tubes*, IEEE Trans Plasma Sci 15, 294-301 (1987).
- [7] P. Andre, *Etude de la composition et des propriétés thermodynamiques des plasmas thermiques à l'équilibre et hors équilibre thermodynamique*, Thèse de l'université de Blaise Pascal, 1995.
- [8] P. Andre, *Composition and thermodynamic properties of abled vapours of PMMA, PA66, PETP, POM and PE*, J. Phys. D : Appl. Phys., 29, 1963-1972 (1996).
- [9] E. Duffour, *Interaction Plasma-isolant. au lanceur Electrothermique et à l'intéraction SF₂ Polyéthylène*, Thèse de l'université de Blaise Pascal, 2000.
- [10] C. Socquet, C. Glauda, Ponthenier J.L., Fi'évet C., and Gentils F. *Etude de l'évolution de la composition chimique du plasma d'arc dans un disjoncteur basse-tension par spectroscopie d'émission*. Orléans,. Colloque sur les arcs électriques, (2005).
- [11] J.P. Touzamet, G. Velleaud, C. Brdys , and S. Servant *A study of the influence of the walls' nature on the behaviour of low-voltage arc breaker by means of an inverse method*, J. Phys. D : Appl. Phys., 32, 121–127, (1999).
- [12] J.P. Touzamet, G. Velleaud, C. Brdys , and S. Servant *A study of the influence of the walls' nature on the behaviour of low-voltage arc breaker by means of an inverse method*, J. Phys. D : Appl. Phys., 32, 121–127, (1999).
- [13] M.I.Boulos, P.Fauchais, E.Pfender, *Thermal Plasmas, Fundamental and Applications*, Plenum Press-New York and London, Volume 1, 1994.
- [14] J.L.Delcroix, *Physique Des Plasmas*, Inter-Editions, Tome 1.

- [15] Wikipédia.
- [16] D.Vacher *Détection, en temps réel, d'éléments métalliques présents dans les rejets atmosphériques industriels par torche à plasma à couplage inductif*, Thèse de l'université de Blaise Pascal, 2001.
- [17] P.Fauchais, J.F. Coudert, B. Pateyron, *La production des plasmas thermiques*, Rev Gén Therm 35, 543-560 (1996).
- [18] B.Pateyron, G. Delluc, N. Calvé, *T&Twinner, la chimie les propriétés de transport en ligne, dans l'intervalle 300K à 20 000K*, Mécanique et industries 6, 651-654 (2006).
- [19] internet
- [20] J.O. Hirschfelder, C.F.Curtiss and R.B.Bird, *Molecular theory of gases and liquids*, John Wiley and Sons, New York, 1964.
- [21] C.Bonnefoi, *Contribution au calcul théorique des coefficients de transport d'un plasma d'azote par la méthode de Chapman-Enskog à l'approximation quatre de Sonine*, Thèse de troisième cycle, Université de Limoges, 1975.
- [22] H.Cabannes, *Cours de mécanique générale*, Dunod, 1966.
- [23] S.Chapman and T.Cowling, *The mathematical theory of non uniform gases*, Cambridge at the university press, London, 1970.
- [24] H.Grad, *On the kinetic theory of rarefield gases*, Communications on pure and mathematics 2,331 (1949).
- [25] C. Rashmi. Desai and J. Ross, *Solutions of Boltzmann equation and transport processes*, The journal of chemical physics, 49, 9-1, (1968).
- [26] F. Reif, *Fundamental of statistical and thermal physics*, Appendice 10 Me Graw. Hill Book Company, Inc. (1965).
- [27] P. Andre, *transport coefficients of plasmas consisting of insulator vapours Application to PE, POM, PMMA, PA66 AND PC*, Eur. Phys. J. Appl. Phys. 25, 169-182 (2004).
- [28] A. D'angola, *thermodynamique and transport properties in equilibrium air plasmas in wide pressure and temperature range*, Eur. Phys. J. D 46, 129-150 (2004).
- [29] R.S. Devoto, *Simplified Expressions for the Transport Properties of Ionized Monoatomic gases*, Phys. Fluides. Rev. 10, 2105 (1967)
- [30] M. Abbaoui, Z. Koalaga, A.Lefort, *Propriétés thermodynamique et de transport des plasmas issus de la vaporisation des isolants PTEE et PE*, J. Phys. III France 2, 455-472 (1992)
- [31] J.N. Butler, R.S. Brokaw, *Thermal conductivity of gas mixtures in chemical equilibrium*
- [32] Z. Koalaga, M. Abbaoui, A Lefort, *Calcul des propriétés thermodynamiques des plasmas d'isolants $C_\alpha H_\beta O_\gamma N_\theta$* Appl. Phys. D. 26, 393-404 (1993).
- [33] B. Cheminat, *Influence de l'ablation des parois sur les caractéristiques d'un arc électrique laminé*, Rev. Phys. Appl. 24, 277-84 (1989).
- [34] M. Abbaoui, Z. Koalaga, A.Lefort *Composition et coefficients de transport des plasmas de matériaux plastiques (polymères)*, Can. J.Phys. 71, 1291 (1993).
- [35] A. R. Bunsell, *Reinforcing fibre in*, Encyclopedia of Applied Physics. VCH publishers, p.343 – 368, (1996).

-
- [36] F. Kermoun, *Composition d'un plasma thermique de polyamide (PA66) produisant des poudres de carbone*, Mémoire de Magister à USTHB, LPCQ (2007).
- [37] CPAT, *Rapport d'activité 2002-2005, Partie 1 : Rapport scientifique*, Centre de physique des plasmas et de leurs applications de Toulouse, Université de Paul Sabatier, Toulouse III
- [38] B. Cheminat, P. Andanson, *Vaporisation d'une anode en argent dans le plasma d'un arc électrique*, J. Phys. D : Appl. Phys. 20, 444-452, (1987).
- [39] R.S. Devoto, *Transport properties of ionized monatomic gases*, The physics of fluids 9, 6 (June 1966).
- [40] R.Sharma, G.Singh, K. Singh, *Higher-order contributions to transport coefficients in two-temperature hydrogen thermal plasma*, PHYSICS OF PLASMAS 18, 063504 (2011).
- [41] G. M Alves¹, G. M Kremer², W. Marques Jr², A. J. Soares³, *A kinetic model for chemical reactions without barriers : transport coefficients and eigenmodes*, Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment (2011).
- [42] V. Colombo, E. Ghedini and P. Sanibondi, *Two-temperature thermodynamic and transport properties of carbon-oxygen*, Plasma Sources Sci. Technol. 20 (2011).