

MÉCANIQUE DES FLUIDES

Christian Carimalo

Chapitre 1

Introduction et cadre théorique général

1.1 Introduction

Sous le terme de fluides sont englobés les liquides et les gaz. La différence essentielle entre solide et fluide tient au fait que dans un fluide une molécule¹ en agitation thermique peut voyager, d'où la propriété de *fluidité* ou de *déformabilité* d'un fluide, alors que dans un solide une molécule garde une position moyenne fixe, d'où le caractère rigide d'un solide. On pourrait définir un fluide comme un milieu qui se déforme tant que lui sont appliqués des efforts, si faibles soient-ils. Ces efforts peuvent d'ailleurs mettre le fluide en mouvement. On parle alors d'écoulement de fluide, objet d'étude de la Dynamique des fluides.

Un fluide est bien sûr constitué de molécules en interaction, ce qui tendrait à donner de ce milieu une image de discontinuité. Cependant, il est possible de le modéliser comme un *milieu continu* lorsqu'on s'intéresse uniquement à ses propriétés macroscopiques. Cette vision s'appuie sur l'existence de trois échelles de distance.

Pour illustrer ceci, considérons au voisinage d'un point M à l'intérieur du fluide un cube d'arête L renfermant un nombre de molécules égal à $N(L)$. La densité de molécules dans le cube est

$$n(L) = \frac{N(L)}{L^3}$$

Etudions alors l'évolution de cette densité lorsqu'on fait varier la taille du cube (fig. 1.1). Lorsque L est très petit, de l'ordre de grandeur du libre parcours moyen ℓ d'une molécule dans le fluide, la densité $n(L)$ présente de très grandes fluctuations qui sont

1. Nous utiliserons le terme de molécule pour désigner les particules considérées comme les constituants ultimes du milieu étudié, afin d'éviter toute confusion avec la notion de particule fluide dont il est question plus loin.

dues aux fluctuations de position des molécules. A cette échelle le fluide est un milieu discontinu. On peut choisir le libre parcours moyen lui-même pour définir l'échelle microscopique L_1 . Ce libre parcours moyen est inversement proportionnel à la concentration moléculaire. On obtient par exemple $\ell \approx 10^{-7}$ m pour l'Argon, dans les conditions normales.

Lorsqu'on augmente la taille du cube, on arrive à une échelle dite *mésoscopique* qui caractérise le domaine entre l'échelle moléculaire où le nombre de molécules est restreint, et l'échelle macroscopique. Le nombre de molécules concernées étant devenu grand², on obtient alors une densité $n(L)$ non fluctuante, de valeur locale $n(M)$, qui peut dépendre de l'endroit où l'on situe le cube dans le fluide. A cette échelle L_2 , le milieu apparaît déjà comme un milieu continu.

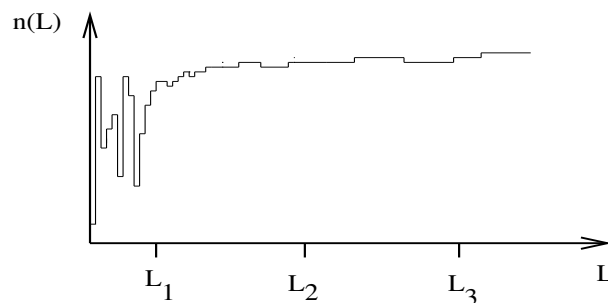


FIGURE 1.1 – Du microscopique au macroscopique

Enfin, l'échelle macroscopique L_3 est celle qui caractérise les variations spatiales de la densité $n(M)$: c'est la distance minimum à parcourir dans le fluide pour observer un changement notable de cette densité macroscopique. Un fluide pourra être modélisé comme un milieu continu si l'on a

$$L_1 \ll L_2 \ll L_3$$

On peut alors donner un sens à ce qu'on appellera une *particule de fluide*. Il s'agit d'une quantité de fluide à l'intérieur d'un volume d'extension $\delta V \simeq L_2^3$, qui contient déjà un très grand nombre de molécules, mais dont la taille mésoscopique permet de considérer que les grandeurs macroscopiques y restent constantes.

Cette notion de particule fluide permet de définir la valeur prise en un point par une grandeur macroscopique telle que la pression, la température, la densité, la vitesse du fluide, comme la valeur moyenne de cette grandeur sur l'extension de la particule de fluide. On peut considérer la particule de fluide comme l'analogue du point matériel en Mécanique usuelle.

². Une goutte d'eau sphérique de 1 mm de diamètre, prise dans les conditions normales, contient $1,75 \cdot 10^{19}$ molécules H_2O

1.2 Densités de probabilité³

Dans le cadre de la mécanique classique non relativiste, considérons un ensemble de N molécules identiques, supposées ponctuelles et de masse m . L'état d'une molécule i à une date donnée est caractérisé par sa position \vec{r}_i et sa quantité de mouvement $\vec{p}_i = m \frac{d\vec{r}_i}{dt}$. Lorsque sont données, à un instant donné, les coordonnées et les quantités de mouvement de toutes les molécules, le système est dit se trouver dans une *phase* déterminée qui peut se représenter par un point dans un espace, appelé *espace des phases*, dont les $6N$ dimensions sont les $3N$ coordonnées cartésiennes et les $3N$ composantes cartésiennes des quantités de mouvement des N molécules. L'espace dont les $3N$ dimensions représentent les coordonnées des molécules est appelé *espace de configuration*, tandis que l'espace dont les $3N$ dimensions représentent les composantes cartésiennes des quantités de mouvement des molécules est appelé *espace complémentaire*. L'élément de volume de l'espace de configuration est $d\Omega_c = d^3r_1 \cdots d^3r_N$ ($d^3r_i = dx_i dy_i dz_i$) et celui de l'espace complémentaire est $d\Omega_p = d^3p_1 \cdots d^3p_N$ ($d^3p_i = dp_{xi} dp_{yi} dp_{zi}$); enfin, l'élément de volume de l'espace des phases, également appelé *extention en phase*, est $d\Omega = d\Omega_c d\Omega_p$.

Le détail de l'évolution temporelle du système, comprenant celui de chacune de ses molécules est généralement inaccessible à l'observation, et ce, d'autant plus que le nombre de molécules à considérer est grand. On ne s'intéresse donc pas à une phase particulière du système, mais plutôt à des moyennes sur toutes les phases a priori envisageables pour ce système. Ces moyennes sont évaluées au moyen d'une *densité de probabilité* d'une phase, notée $D(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N; \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$, grandeur positive ou nulle, le produit $Dd\Omega$ étant la probabilité de trouver le point représentatif du système à l'intérieur de l'extension en phase $d\Omega$ au voisinage du point défini par les données $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N$. Notons que D , d'une part, peut éventuellement dépendre du temps et, d'autre part, les molécules étant identiques, doit être invariante dans une permutation quelconque entre les données (\vec{r}, \vec{p}) des molécules. La somme de toutes les probabilités étant égale à 1, on doit avoir

$$\int Dd\Omega = 1 \quad (1.1)$$

l'intégrale étant étendue à toutes les valeurs permises des coordonnées et des quantités de mouvement. Pour ces dernières, les limites peuvent être choisies comme $-\infty$ et

3. J. Yvon : "Les corrélations et l'entropie", Monographies Dunod, Paris 1965; M. Born, *Kinetic Theory of Condensed Matter*, Research, 1 (1948) 165-173; M. Born, K. Fuchs, *The Statistical Mechanics of Condensing Systems*, Proc. Roy. Soc. A, 128 (1938) 391-414; M. Born, H.S. Green, *A General Kinetic Theory of Liquids*, Proc. Roy. Soc. A, 188 (1946) 10-18; Nature, 159 (1947) 251-253; E. Arnous, D. Massignon, *Théorie Cinétique des Liquides de M. Born et R.S. Green*, Le Journal de Physique et Le Radium, Série VIII, Tome X (1949) 45-55.

$+\infty$, la densité étant certainement nulle pour des vitesses infiniment grandes. Quant aux limites sur les coordonnées, elles sont définies par le volume à l'intérieur duquel le système est confiné. Si on ne s'intéresse qu'à la configuration, les moyennes seront évaluées au moyen de la densité de probabilité de configuration définie par

$$D_c(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = \int D d\Omega_p, \quad \text{telle que} \quad \int D_c d\Omega_c = 1 \quad (1.2)$$

La moyenne d'une grandeur physique représentée par une fonction F dépendant de la phase est définie par

$$\langle F \rangle = \int F D d\Omega \quad (1.3)$$

et sa fluctuation par

$$\Delta F = F - \langle F \rangle \quad (1.4)$$

Cette dernière a une valeur moyenne nulle et pour quantifier son importance, on calcule la moyenne de son carré :

$$\langle (\Delta F)^2 \rangle = \langle F^2 \rangle - \langle F \rangle^2 \quad (1.5)$$

qui est l'écart quadratique moyen de F .

1.3 Densités moléculaires dans l'espace de configuration

1.3.1 Densité simple

Soit $\theta_A(i)$ la fonction attachée à la molécule numérotée i et au domaine spatial A telle que $\theta_A(i) = 1$ si cette molécule est dans A , et $\theta_A(i) = 0$ si elle est à l'extérieur de A . Le nombre de molécules dans A est

$$N_A = \sum_{i=1}^N \theta_A(i) \quad (1.6)$$

et sa moyenne est

$$\langle N_A \rangle = \int N_A D d\Omega = \int N_A D_c d\Omega_c = N \int \theta_A(1) D_c d\Omega_c \quad (1.7)$$

Ceci amène à définir la *densité simple* en nombre de molécules

$$n_1 = n(\vec{r}) = N \int D_c(\vec{r}, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N) d^3 r_2 \cdots d^3 r_N, \quad \text{telle que}$$

$$\int n_1 d^3 r_1 = N \quad (1.8)$$

et l'on obtient

$$\langle N_A \rangle = \int N_A n_1 d^3 r_1 = \int_A n_1 d^3 r_1 \quad (1.9)$$

1.3.2 Densité double

Considérons ensuite la somme double

$$C_A = \sum_{i < j} \theta_A(i) \theta_A(j) \quad (1.10)$$

qui fait intervenir tous les couples possibles de molécules et comporte $N(N - 1)/2$ termes. Elle est égale au nombre de couples de molécules présents dans A . Sa valeur moyenne est

$$\langle C_A \rangle = \frac{1}{2} N(N - 1) \langle \theta_A(1) \theta_A(2) \rangle \quad (1.11)$$

Ceci amène à définir la *densité double*

$$n_{12} = n(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N(N - 1) \int D_c d^3 r_3 \cdots d^3 r_N \quad (1.12)$$

telle que la grandeur $n_{12} d^3 r_1 d^3 r_2$ est la probabilité de trouver à la fois une molécule à l'intérieur de $d^3 r_1$ au voisinage de \vec{r}_1 et une autre molécule à l'intérieur de $d^3 r_2$ au voisinage de \vec{r}_2 . L'intégrale

$$\int n_{12} d^3 r_1 d^3 r_2 = N(N - 1) \quad (1.13)$$

est bien le nombre de couples non distincts que l'on peut former entre les N molécules. Si l'on connaît cette densité, la densité simple définie précédemment s'en déduit par la relation

$$(N - 1)n_1 = \int n_{12} d^3 r_2 \quad (1.14)$$

La moyenne de C_A s'exprime au moyen de la densité double :

$$\langle C_A \rangle = \frac{1}{2} \iint \theta_A(1)\theta_A(2)n_{12}d^3r_1d^3r_2 \quad (1.15)$$

Montrons aussi comment le carré de l'écart quadratique moyen de N_A , soit $\langle (\Delta N_A)^2 \rangle = \langle N_A^2 \rangle - \langle N_A \rangle^2$, peut s'exprimer à l'aide des densités simple et double. Notant que $\theta_A^2(i) = \theta_A(i)$, on a

$$\begin{aligned} N_A^2 &= \sum_i \theta_A(i) + \sum_i \sum_{j \neq i} \theta_A(i)\theta_A(j), \quad \langle N_A \rangle^2 = \int n_1 d^3r_1 \int n_1 d^3r_1, \quad \text{d'où} \\ \langle (\Delta N_A)^2 \rangle &= \int_A n_1 d^3r_1 + \int_A \int_A [n_{12} - n_1 n_2] d^3r_1 d^3r_2 \end{aligned} \quad (1.16)$$

1.4 Densités en phase

1.4.1 Densités simple et double

Il est utile aussi de définir des densités moléculaires dans l'espace des phases. Ainsi, la densité simple de molécule en phase est

$$\mu_1 = \mu(\vec{r}_1; \vec{p}_1) = N \int D d\Omega_2 \cdots d\Omega_N \quad (1.17)$$

et la grandeur $\mu_1 d\Omega_1$ est la probabilité de trouver une molécule dont le point représentatif dans un espace des phases à 6 dimensions se trouve à l'intérieur de l'extention $d\Omega_1$ au voisinage du point défini par la donnée (\vec{r}_1, \vec{p}_1) , autrement dit, la probabilité de trouver une molécule à la position \vec{r}_1 à d^3r_1 près, avec une quantité de mouvement \vec{p}_1 à d^3p_1 près. De même, la densité double en phase est définie par

$$\mu_{12} = \mu(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{p}_1, \vec{p}_2) = N(N-1) \int D d\Omega_3 \cdots d\Omega_N \quad (1.18)$$

et $\mu_{12} d\Omega_1 d\Omega_2$ est la probabilité de trouver à la fois une molécule au point (\vec{r}_1, \vec{p}_1) à $d\Omega_1$ près, et une autre molécule au point (\vec{r}_2, \vec{p}_2) à $d\Omega_2$ près. On a bien sûr

$$n_1 = \int \mu_1 d^3p_1, \quad n_{12} = \int \mu_{12} d^3p_1 d^3p_2, \quad (N-1)\mu_1 = \int \mu_{12} d\Omega_2 \quad (1.19)$$

1.4.2 Moyennes locales

Enfin, on définit la *fonction de distribution* f_1 de la *quantité de mouvement* en écrivant

$$\mu_1 = n_1 f_1 \quad (1.20)$$

Cette fonction dépend à la fois des coordonnées d'espace et de la quantité de mouvement. Elle satisfait la condition de normalisation

$$\int f_1 d^3 p_1 = 1 \quad (1.21)$$

et permet de définir des *moyennes locales* qui jouent un rôle important en Mécanique des fluides. Envisageons par exemple la quantité de mouvement d'une molécule. Sa moyenne locale sera

$$(\overline{p}) = \int \overline{p}_1 f_1 d^3 p_1 \quad (1.22)$$

Cette moyenne dépend généralement des coordonnées et permet de définir à chaque instant un champ des vitesses

$$(\overline{v}) = \frac{(\overline{p})}{m} \quad (1.23)$$

qui est le *champ des vitesses hydrodynamique*. On notera que les moyennes locales sont évaluées à l'aide d'une densité locale de probabilité sur les quantités de mouvement, qui n'est pertinente que si elle se fonde sur les données d'un nombre de molécules suffisamment grand. On attribuera donc opportunément ces moyennes aux particules de fluide mésoscopiques définies précédemment.

1.5 Grandeurs microscopiques et leurs moyennes

Les densités spatiales introduites précédemment peuvent être envisagées comme des moyennes de grandeurs microscopiques. Considérons par exemple la grandeur

$$\nu(\overline{r}) = \sum_i \delta(\overline{r} - \overline{r}_i) \quad (1.24)$$

où $\delta(\overline{r} - \overline{r}_i) = \delta(x - x_i)\delta(y - y_i)\delta(z - z_i)$ est la distribution de Dirac triple. Sa moyenne est la densité simple spatiale :

$$\langle \nu \rangle = \int \nu D d\Omega = N \int D_c d^3 r_2 \cdots d^3 r_N = n_1 \quad (1.25)$$

De même, la densité spatiale double est la moyenne de

$$\nu(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_i \sum_{j \neq i} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_j) \quad (1.26)$$

Nous supposons que les molécules interagissent entre elles deux à deux. La force inter-molécule microscopique qui s'exerce au point \vec{r} est

$$\vec{F} = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij} \quad (1.27)$$

où \vec{F}_{ij} est la force que la molécule j exerce sur la molécule i . Celle-ci dérive de l'énergie potentielle d'interaction W_{ij} entre les deux molécules :

$$\vec{F}_{ij} = - \vec{\nabla}_i W_{ij}$$

et nous admettrons qu'il s'agit d'une force centrale. En posant $\vec{R}_{ij} = \vec{r}_i - \vec{r}_j$, $R_{ij} = |\vec{R}_{ij}|$, on a donc

$$\vec{F}_{ij} = - \frac{\vec{R}_{ij}}{R_{ij}} \frac{dW_{ij}}{dR_{ij}}$$

La moyenne de (1.27) au point \vec{r} est

$$\begin{aligned} \langle \vec{F} \rangle &= N(N-1) \int \theta_A(1) \vec{F}_{12} \delta(\vec{r} - \vec{r}_1) D_c d\Omega_c \\ &= \int n_{12} \vec{F}_{12} d^3 r_2 = n_1 \vec{\mathcal{F}}_1 \end{aligned} \quad (1.28)$$

où $\vec{\mathcal{F}}_1$ est le *champ moléculaire*.

1.6 La pression inter-molécules

La force résultante subie par toutes les molécules de A venant de toutes les autres molécules, y compris celles de A , est

$$\vec{F}_A = \sum_i \theta_A(i) \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij} \quad (1.29)$$

Sa valeur moyenne est

$$\begin{aligned} \langle \vec{F}_A \rangle &= N(N-1) \int \theta_A(1) \vec{F}_{12} D_c d\Omega_c \\ &= N(N-1) \int \theta_A(1) \vec{F}_{12} d^3r_1 d^3r_2 \int D_c d^3r_3 \cdots d^3r_N = \int \theta_A(1) n_{12} \vec{F}_{12} d^3r_1 d^3r_2 \\ &= \int_A n_1 \vec{\mathcal{F}}_1 d^3r_1 \end{aligned} \quad (1.30)$$

Elle s'exprime donc simplement en fonction du champ moléculaire $\vec{\mathcal{F}}$. D'un autre côté, tenant compte de $\vec{F}_{ij} = -\vec{F}_{ji}$, la force (1.29) peut être réexprimée comme suit

$$\vec{F}_A = \sum_j \theta_A(j) \sum_{i \neq j} \vec{F}_{ji} = - \sum_i \sum_{j \neq i} \theta_A(j) \vec{F}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} [\theta_A(i) - \theta_A(j)] \vec{F}_{ij}$$

Comme $\theta_A(i) - \theta_A(j)$ n'est différent de 0 que si le couple (i, j) est à cheval sur la surface frontière S de A , on peut s'attendre à ce que la somme ci-dessus s'exprime comme une intégrale sur la surface S . Pour le montrer, utilisons la représentation suivante de θ_A

$$\theta_A(\vec{r}) = \int_A \delta(\vec{r} - \vec{r}_A) d^3r_A$$

et écrivons

$$d\theta_A = \int_A \vec{dr} \cdot \vec{\nabla}_r \delta(\vec{r} - \vec{r}') d^3r'$$

Comme $\vec{\nabla}_r \delta(\vec{r} - \vec{r}_A) = -\vec{\nabla}_{r_A} \delta(\vec{r} - \vec{r}_A)$, il vient

$$\begin{aligned} d\theta_A &= - \int_A \vec{dr} \cdot \vec{\nabla}_{r_A} \delta(\vec{r} - \vec{r}_A) d^3r_A = - \int_A \text{div}_{r_A} \left[\vec{dr} \delta(\vec{r} - \vec{r}_A) \right] d^3r_A \\ &= - \int_S \vec{dS} \cdot \vec{dr} \delta(\vec{r} - \vec{r}_S) \end{aligned}$$

On obtient ainsi

$$\theta(i) - \theta(j) = - \int_j^i \vec{dr} \cdot \int_S \vec{dS} \delta(\vec{r} - \vec{r}_S) \quad (1.31)$$

D'où

$$\begin{aligned} \vec{F}_A &= -\frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij} \int_j^i \vec{dr} \cdot \int_S \vec{dS} \delta(\vec{r} - \vec{r}_S) \\ &= \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij} \int_i^j \vec{dr} \cdot \int_S \vec{dS} \delta(\vec{r} - \vec{r}_S) \end{aligned}$$

Puis

$$\begin{aligned} \left(\langle \vec{F}_A \rangle \right)_x &= \int D_c d\Omega_c \left(\vec{F}_A \right)_x \\ &= \frac{1}{2} N(N-1) \int d^3 r_1 d^3 r_2 \left(\vec{F}_{12} \right)_x \int_1^2 \vec{dr} \cdot \int_S \vec{dS} \delta(\vec{r} - \vec{r}_S) \int D_c d^3 r_3 \cdots d^3 r_N \\ &= \frac{1}{2} \int_S \vec{dS} \cdot \int d^3 r_1 d^3 r_2 n_{12} \left(\vec{F}_{12} \right)_x \int_1^2 \vec{dr} \delta(\vec{r} - \vec{r}_S) \end{aligned}$$

Simplifions cette expression comme suit. Le chemin pour aller de (1) vers (2) pouvant être quelconque, choisissons-le comme selon la ligne droite joignant ces deux points, c'est-à-dire, posons $\vec{r} = \vec{r}_1 + u \vec{R}$, où $\vec{R} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$ et $0 \leq u \leq 1$. Ainsi,

$$\int_1^2 \vec{dr} \delta(\vec{r} - \vec{r}_S) = \vec{R} \int_0^1 du \delta(\vec{r}_1 + u \vec{R} - \vec{r}_S)$$

Ensuite, on tire avantage du fait que la force centrale $\vec{F}_{12} = + \frac{\vec{R}}{R} \frac{dW_{12}}{dR}$ ne dépend que de \vec{R} pour effectuer le changement de variable $\vec{r}_2 \rightarrow \vec{R}$, \vec{r}_1 étant fixé; puis, en dernière étape, on fait disparaître la distribution δ en intégrant sur \vec{r}_1 , \vec{r}_S étant fixé. On aboutit ainsi à

$$\begin{aligned} \left(\langle \vec{F}_A \rangle \right)_x &= \frac{1}{2} \int_S \vec{dS} \cdot \int d^3 R \vec{R} \frac{R_x}{R} \frac{dW_{12}}{dR} \bar{n}_{12}, \quad \text{où} \\ \bar{n}_{12} &= \int_0^1 du n_{12}(\vec{r}_S - u \vec{R}, \vec{r}_S + (1-u) \vec{R}) \end{aligned} \quad (1.32)$$

Cette expression peut être encore transformée pour la rendre plus symétrique en posant $r_{1S} = |\vec{r}_S - \vec{r}_1| = uR$, $r_{2S} = |\vec{r}_S - \vec{r}_2| = (1-u)R$. On a alors

$$du d^3 R = R^2 d\mathcal{O} du dR \equiv R dr_{1S} dr_{S2} d\mathcal{O}$$

$d\mathcal{O}$ étant l'angle solide élémentaire associé à \vec{R} . D'où

$$\left(\langle \vec{F}_A \rangle\right)_x = \frac{1}{2} \int_S dS \cdot \int_0^\infty dr_{1S} \int_0^\infty dr_{S2} \int_{4\pi} d\mathcal{O} \vec{R} R_x \frac{dW_{12}}{dR} \bar{n}_{12}, \quad \text{avec} \quad (1.33)$$

$$R = r_{1S} + r_{S2}, \quad \bar{n}_{12} = \bar{n}_{12}(\vec{r}_S - r_{1S} \vec{n}, \vec{r}_S + r_{S2} \vec{n})$$

\vec{n} étant le vecteur unitaire de \vec{R} . On voit ainsi apparaître un tenseur symétrique de rang 2 :

$$p_{ij}(M_S) = -\frac{1}{2} \int_0^\infty dr_{1S} \int_0^\infty dr_{S2} \int_{4\pi} d\mathcal{O} R_i R_j \frac{dW_{12}}{dR} \bar{n}_{12} \quad (1.34)$$

appelé *tenseur de pression inter-molécules*, au moyen duquel une composante quelconque de la moyenne des forces s'exerçant sur A , provenant des interactions entre molécules, s'exprime comme

$$\left(\langle \vec{F}_A \rangle\right)_k = - \int_S p_{k\ell}(M_S) dS_\ell \quad (1.35)$$

D'un autre côté, on peut exprimer cette moyenne à l'aide du champ moléculaire introduit dans (1.28) :

$$\langle \vec{F}_A \rangle = \int_A d^3 r_A n_1 \vec{\mathcal{F}}_1$$

On en déduit immédiatement la relation suivante entre champ moléculaire et champ des pressions inter-molécules⁴

$$n \mathcal{F}_k = -\frac{\partial p_{k\ell}}{\partial x_\ell} = -\frac{\partial p_{kx}}{\partial x} - \frac{\partial p_{ky}}{\partial y} - \frac{\partial p_{kz}}{\partial z} \quad (1.36)$$

On notera que si les forces sont répulsives, $\frac{dW_{12}}{dR}$ est négatif et le champ des pressions inter-molécules (1.34) est toujours positif.

4. On utilise la convention de sommation d'Einstein.

1.7 Moment des forces

Le moment par rapport à un point fixe O des forces inter-moléculaires subies par toutes les molécules du domaine A est

$$\vec{M}_A = \sum_i \theta_A(i) \vec{OM}_i \wedge \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq j} [\theta_A(i) \vec{OM}_i - \theta_A(j) \vec{OM}_j] \wedge \vec{F}_{ij}$$

Profitons du fait que les forces inter-molécules sont centrales pour écrire

$$\begin{aligned} \vec{OM}_j \wedge \vec{F}_{ij} &= [\vec{OM}_i + \vec{M}_i \vec{M}_j] \wedge \vec{F}_{ij} \equiv \vec{OM}_i \wedge \vec{F}_{ij}, \quad \text{d'où} \\ \vec{M}_A &= \frac{1}{2} \sum_i \sum_{i \neq j} [\theta_A(i) - \theta_A(j)] \vec{OM}_i \wedge \vec{F}_{ij} \end{aligned}$$

Pour exprimer la valeur moyenne de \vec{M}_A , on procède comme il a été fait pour celle de \vec{F}_A dans la précédente section. Tenant compte de $\vec{r}_1 = \vec{r}_S - u \vec{R}$, soit $\vec{r}_1 \wedge \vec{R} = \vec{r}_S \wedge \vec{R}$, on obtient finalement

$$\left(\langle \vec{M}_A \rangle \right)_x = \frac{1}{2} \int_S \vec{dS} \cdot \int_0^\infty dr_{1S} \int_0^\infty dr_{S2} \int_{4\pi} d\mathcal{O} \vec{R} \left(\vec{r}_S \wedge \vec{R} \right)_x \frac{dW_{12}}{dR} n_{12} \quad (1.37)$$

soit, tenant compte de (1.34),

$$\left(\langle \vec{M}_A \rangle \right)_i = -\epsilon_{ijk} \int_S x_{Sj} p_{kl} dS_\ell \quad (1.38)$$

Ce moment moyen s'exprime donc à l'aide d'une intégrale de surface.

1.8 Le théorème de Liouville et ses conséquences

1.8.1 Théorème et équation de Liouville

Il est connu que l'extention en phase $d\Omega$ est invariante sous une transformation canonique, c'est-à-dire, une transformation des $6N$ coordonnées canoniques \vec{r}_i, \vec{p}_i ($i = 1, \dots, N$) qui laisse invariante la forme des équations du mouvement dans leur expression hamiltonienne⁵. L'évolution temporelle du système pouvant elle-même être considérée comme une transformation canonique, on a

5. Voir L. Landau, E. Lifchitz, "Mécanique", Ed. Mir, 2nde ed., Moscou 1965, §46.

$$d\Omega(t') = d\Omega(t), \quad \text{soit} \quad \frac{d(d\Omega)}{dt} = 0 \quad (\text{Théorème de Liouville}) \quad (1.39)$$

Cela signifie que, considérant les divers points à l'intérieur de $d\Omega(t)$ comme autant de conditions initiales différentes pour le même mouvement à étudier, si l'on suit au fil du temps les trajectoires qui leur correspondent, les points images des précédents à la date t' se retrouvent tous dans la même extension $d\Omega(t')$.

Or, pour le système qui nous intéresse, la probabilité de le trouver à la date t dans une phase contenue dans $d\Omega(t)$ est $dP(t) = D(t)d\Omega(t)$. A la date t' le système a évolué, mais, parti de $d\Omega(t)$, il doit se trouver obligatoirement dans $d\Omega(t')$. Par conséquent, la probabilité $dP(t') = D(t')d\Omega(t')$ de le trouver dans $d\Omega(t')$ doit être rigoureusement égale à $dP(t)$. Utilisant le théorème de Liouville, on en déduit $D(t') = D(t)$: la densité de probabilité reste inchangée lors de l'évolution du système, soit

$$\frac{dD}{dt} = 0 \quad (1.40)$$

Explicitant la dépendance de D vis-à-vis des coordonnées canoniques (q_i, p_i) , la dérivée totale par rapport au temps (1.40) s'écrit

$$\frac{dD}{dt} = \frac{\partial D}{\partial t} + \sum_i \left[\dot{q}_i \frac{\partial D}{\partial q_i} + \dot{p}_i \frac{\partial D}{\partial p_i} \right]$$

Utilisons les équations de Hamilton

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}$$

où H est le hamiltonien du système pour obtenir

$$\frac{dD}{dt} = \frac{\partial D}{\partial t} - \{H, D\} \quad (1.41)$$

où

$$\{H, D\} = \sum_i \left[\frac{\partial D}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial D}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right] \quad (1.42)$$

sont les *crochets de Poisson* de H et D . L'équation (1.41) est l'équation de Liouville, que l'on réécrit souvent sous la forme "opératoirelle"

$$\frac{dD}{dt} = \frac{\partial D}{\partial t} + \mathcal{L}D \quad \text{où} \quad \mathcal{L}D = -\{H, D\} \quad (1.43)$$

\mathcal{L} étant l'opérateur de Liouville. Le Hamiltonien du système étudié est

$$H = \frac{1}{2m} \sum_i \vec{p}_i^2 + \sum_i \Phi_i + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} W_{ij} \quad (1.44)$$

où l'on a supposé que le système est de plus soumis à un champ de forces extérieur dérivant d'une énergie potentielle $\Phi(M)$. A l'aide de ces données, l'équation de Liouville s'écrit

$$\frac{\partial D}{\partial t} + \sum_i \left[\frac{1}{m} \vec{p}_i \cdot \vec{\nabla}_{r_i} + \left(\vec{F}_i + \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij} \right) \cdot \vec{\nabla}_{p_i} \right] D = 0 \quad (1.45)$$

où $\vec{F}_i = - \left(\vec{\nabla}_r \Phi \right) (r_i)$.

1.8.2 Dérivation temporelle et valeurs moyennes

La dérivée par rapport au temps de la moyenne d'une grandeur G est

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle G \rangle &= \int \frac{\partial G D}{\partial t} d\Omega = \int \left[G \frac{\partial D}{\partial t} + D \frac{\partial G}{\partial t} \right] d\Omega \\ &= \int \left[-G \mathcal{L} D + D \frac{\partial G}{\partial t} \right] d\Omega = \int \left[D \left(\frac{\partial G}{\partial t} + \mathcal{L} G \right) + \mathcal{L}(D G) \right] d\Omega \end{aligned}$$

où il a été tenu compte de la propriété de dérivation de l'opérateur de Liouville : $\mathcal{L}(D G) = D \mathcal{L} G + G \mathcal{L} D$. L'intégrale

$$\int \mathcal{L}(D G) d\Omega$$

où l'intégrand est composé de dérivées partielles $\frac{\partial D G}{\partial q_i}$ et $\frac{\partial D G}{\partial p_i}$ peut être transformée en intégrale de flux sur la frontière du domaine accessible aux phases du système dans l'espace des phases, domaine qui pourrait s'étendre à l'espace des phases en entier. Nous admettons que la probabilité est nulle de trouver le système dans une phase en dehors ou sur la frontière de ce domaine. Le système est alors qualifié de *fermé*. Sous cette condition de fermeture, ladite intégrale de flux où D apparaît sans aucune dérivation, est nulle. On en déduit une importante conséquence :

$$\frac{d}{dt} \langle G \rangle = \langle \frac{dG}{dt} \rangle \quad (1.46)$$

c'est-à-dire, la dérivée temporelle de la moyenne d'une grandeur est égale à la moyenne de la dérivée temporelle de cette grandeur.

1.9 Equations de diffusion

Cherchons l'équation d'évolution de la densité en phase simple. Pour cela, on multiplie l'équation (1.45) par $N d\Omega_2 \cdots d\Omega_N$ et l'on intègre sur tout le domaine des phases accessibles. Tous les termes se présentant comme une dérivée donnent un résultat nul en vertu de l'hypothèse de fermeture. On obtient finalement

$$\boxed{\frac{\partial \mu_1}{\partial t} + \left[\frac{1}{m} \vec{p}_1 \cdot \vec{\nabla}_{r_1} + \vec{F}_1 \cdot \vec{\nabla}_{p_1} \right] \mu_1 + \int \vec{F}_{12} \cdot \vec{\nabla}_{p_1} \mu_{12} d\Omega_2 = 0} \quad (1.47)$$

où l'on voit que l'évolution de la densité simple dépend de la densité double. On montre de même que l'évolution de la densité double dépend de la densité triple :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial \mu_{12}}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \vec{\nabla}_{r_1} \mu_{12} + \frac{\vec{p}_2}{m} \cdot \vec{\nabla}_{r_2} \mu_{12} + [\vec{F}_1 + \vec{F}_{12}] \cdot \vec{\nabla}_{p_1} \mu_{12} \\ & + [\vec{F}_2 + \vec{F}_{21}] \cdot \vec{\nabla}_{p_2} \mu_{12} + \int [\vec{F}_{13} \cdot \vec{\nabla}_{p_1} + \vec{F}_{23} \cdot \vec{\nabla}_{p_2}] \mu_{123} d\Omega_3 = 0 \end{aligned} \quad (1.48)$$

1.9.1 Diffusion des molécules

Multiplions (1.47) par $d^3 p_1$ et intégrons sur tout l'espace accessible de la quantité de mouvement. Les termes comportant une dérivée par rapport à la quantité de mouvement donnent un résultat nul et on aboutit à

$$\boxed{\frac{\partial n_1}{\partial t} + \text{div}_{r_1} [(\vec{v}_1) n_1] = 0} \quad (1.49)$$

Cette équation traduit la conservation du nombre de molécules et pour cette raison est appelée *équation de conservation numérique*. En fait, une équation de ce type est couramment appelée *équation de conservation* tout court, ou encore *équation de continuité*. On peut aussi exprimer (1.49) sous une autre forme en introduisant la masse volumique $\rho = mn$ et en notant simplement $\vec{V}(M, t) = (\vec{v}_1)$ le champ des vitesses hydrodynamiques :

$$\boxed{\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} [\rho \vec{V}] = 0} \quad (1.50)$$

C'est l'équation locale traduisant la conservation de la masse.

1.9.2 Diffusion de la quantité de mouvement

Multiplions maintenant (1.47) par $p_{1k}d^3p_1$ et intégrons :

$$\begin{aligned}
 1) \int d^3p_1 p_{1k} \frac{\partial \mu_1}{\partial t} &= \frac{\partial n_1(p_{1k})}{\partial t} \\
 2) \int d^3p_1 p_k \vec{p}_1 \cdot \vec{\nabla}_{r_1} \mu_1 &= \text{div}_{r_1} \left[n_1(p_k \vec{p}) \right] \\
 3) \int d^3p_1 p_{1k} \vec{F}_1 \cdot \vec{\nabla}_{p_1} \mu_1 &= \int d^3p_1 \left[\frac{\partial}{\partial p_{1\ell}} (p_k F_{1\ell} \mu_1) - F_{1k} \mu_1 \right] = -n_1 F_{1k} \\
 4) \int d^3p_1 d\Omega_2 p_{1k} \vec{F}_{12} \cdot \vec{\nabla}_{p_1} \mu_{12} &= \int d^3p_1 d\Omega_2 \left[\frac{\partial}{\partial p_{1\ell}} (p_k F_{12\ell} \mu_{12}) - F_{12k} \mu_{12} \right] \\
 &= -n_1 F_{1k};
 \end{aligned}$$

Introduisons l'écart de la quantité de mouvement par rapport à sa valeur moyenne locale : $P_k = p_k - \langle p_k \rangle$; on a $\langle p_k p_\ell \rangle = \langle P_k P_\ell \rangle + \langle p_k \rangle \langle p_\ell \rangle$, ce qui conduit à définir le tenseur de *pression cinétique* par la formule

$$K_{k\ell} = n \frac{\langle P_k P_\ell \rangle}{m} \quad (1.51)$$

En omettant l'indice 1 et en tenant compte de (1.36), on obtient donc

$$\frac{\partial n(p_k)}{\partial t} + \frac{1}{m} \partial_\ell n(p_k)(p_\ell) = n F_k - \partial_\ell K_{k\ell} - \partial_\ell p_{k\ell} \quad (1.52)$$

Le *tenseur des pressions total* est défini comme la somme du tenseur de pression cinétique et du tenseur de pression inter-molécules :

$$P_{k\ell} = K_{k\ell} + p_{k\ell} \quad (1.53)$$

Tenons compte de (1.49) pour écrire

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial n(p_k)}{\partial t} + \frac{1}{m} \partial_\ell n(p_k)(p_\ell) &= -(p_k) \partial_\ell n(v_\ell) + n \frac{\partial(p_k)}{\partial t} + (p_k) \partial_\ell n(v_\ell) + n(v_\ell) \partial_\ell(p_k) \\
 &= n \frac{\partial(p_k)}{\partial t} + n(v_\ell) \partial_\ell(p_k) = nm \left[\frac{\partial V_k}{\partial t} + V_\ell \partial_\ell V_k \right], \quad \text{d'où}
 \end{aligned}$$

$$m \left[\frac{\partial V_k}{\partial t} + V_\ell \partial_\ell V_k \right] = F_k - \frac{1}{n} \partial_\ell P_{k\ell} \quad (1.54)$$

Telle est l'équation de diffusion de la quantité de mouvement. On l'écrit aussi sous la forme

$$\boxed{m \frac{DV_k}{Dt} = F_k - \frac{1}{n} \partial_\ell P_{k\ell}} \quad (1.55)$$

en introduisant l'opérateur de *dérivation totale par rapport au temps*

$$\boxed{\frac{D}{Dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla}} \quad (1.56)$$

appelée aussi *dérivée particulaire*. En utilisant (1.50), on peut aussi récrire (1.55) comme

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{P}_k}{\partial t} + \text{div } \vec{V} \mathcal{P}_k = \rho f_k - \partial_\ell P_{k\ell}} \quad (1.57)$$

où $\mathcal{P}_k = \rho V_k$ est la kème composante de la densité volumique de quantité de mouvement et f_k la kème composante de la densité massique F_k/m de la force extérieure.

Pour compléter, montrons que (1.51) correspond bien à la pression cinétique dans le cas d'un gaz parfait globalement au repos (donc à l'équilibre thermodynamique). On a alors $(p_a) = 0$ et $(P_a P_b) = (p_a p_b) = \delta_{ab} (p_a^2)$ et le théorème d'équipartition de l'énergie donne $(p_a^2) = 2m \times \frac{kT}{2}$, k étant la constante de Boltzman et T la température Kelvin. D'où $K_{ab} = \delta_{ab} P$, P étant la pression du gaz, donnée par $P = nkT$.

Faisons aussi les remarques suivantes concernant le tenseur (1.53) que nous avons appelé "tenseur des pressions total". Tout d'abord, en Mécanique des fluides, les fluides en mouvement ne sont pas en équilibre thermodynamique, et la grandeur appelée "pression" représente plutôt une contrainte mécanique, a priori différente de la pression définie en Thermodynamique usuelle où les fluides étudiés sont nécessairement en équilibre thermodynamique. Le *tenseur des contraintes*, caractérisant les contraintes mécaniques au sein d'un fluide en écoulement est défini par

$$\boxed{\sigma_{k\ell} = -P_{k\ell}} \quad (1.58)$$

C'est un tenseur de rang deux, symétrique. Comme en (1.35), la force moyenne s'exerçant sur un volume A du fluide et résultant de ces contraintes a pour composantes

$$F_{Ak} = \int_S \sigma_{k\ell} dS_\ell \quad (1.59)$$

l'intégrale étant étendue à toute la surface S de A . En un point de cette surface où la normale pointant vers l'extérieur de A est \vec{u} , un élément dS de surface est soumis à la force de composantes $dF_{Ak} = \sigma_{kl} u_l dS$, laquelle n'est généralement pas perpendiculaire à la surface.

1.9.3 Diffusion du moment cinétique

Le moment cinétique associé au domaine A est

$$\vec{L}_A = \sum_i \theta_A(i) \vec{OM}_i \wedge \vec{p}_i$$

et a pour valeur moyenne

$$\begin{aligned} \langle \vec{L}_A \rangle &= \int \sum_i d\Omega_1 \cdots d\Omega_N \theta_A(i) \vec{OM}_i \wedge \vec{p}_i D = \int d^3r_1 d^3p_1 \mu_1 \theta_A(1) \vec{OM}_1 \wedge \vec{p}_1 \\ &= \int_A d^3r \int d^3r_1 \delta(\vec{r} - \vec{r}_1) \vec{r} \wedge mn \vec{V}, \text{ soit} \\ \langle \vec{L}_A \rangle &= \int_A d^3r \vec{r} \wedge \rho \vec{V} \end{aligned} \quad (1.60)$$

Cette dernière expression nous permet d'identifier la densité volumique de moment cinétique moyen à

$$\vec{\mathcal{L}} = \vec{r} \wedge \rho \vec{V} \quad (1.61)$$

Pour obtenir l'équation de diffusion du moment cinétique, il nous suffit de partir de (1.50) et (1.54). Ecrivant $\mathcal{L}_i = \rho \epsilon_{ijk} x_j V_k$. On a

$$\begin{aligned} \frac{D\mathcal{L}_i}{Dt} &= \epsilon_{ijk} x_j \left[\frac{D\rho}{Dt} V_k + \rho \frac{DV_k}{Dt} \right] \\ &= \epsilon_{ijk} x_j \left[-\rho V_k \operatorname{div} \vec{V} + \rho f_k - \partial_\ell P_{k\ell} \right] = \frac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial t} + \epsilon_{ijk} x_j V_\ell \partial_\ell (\rho V_k) \end{aligned}$$

$$m \epsilon_{ijk} x_j \left[\frac{\partial V_k}{\partial t} + V_\ell \partial_\ell V_k \right] = \frac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial t} + m \epsilon_{ijk} [V_\ell \partial_\ell (x_j V_k) - V_j V_k] = \frac{\partial \mathcal{L}_i}{\partial t} + V_\ell \partial_\ell \mathcal{L}_i = \frac{D\mathcal{L}_i}{Dt}$$

Par ailleurs,

$$\epsilon_{ijk} x_j \partial_\ell P_{k\ell} = \epsilon_{ijk} [\partial_\ell (x_j P_{k\ell}) - P_{jk}] = \partial_\ell [\epsilon_{ijk} x_j P_{k\ell}]$$

où l'on tient compte du fait que le tenseur de pression est symétrique. On en déduit finalement

$$\boxed{\frac{\partial \mathcal{L}_k}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{V} \mathcal{L}_k = \epsilon_{ijk} x_j \rho f_k - \partial_\ell [\epsilon_{ijk} x_j P_{k\ell}]} \quad (1.62)$$

1.9.4 Diffusion de l'énergie

On cherche ici à établir une équation décrivant l'évolution temporelle d'une moyenne locale de l'énergie. Remarquons tout d'abord que

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= N \langle \frac{p_1^2}{2m} \rangle + N \langle \Phi_1 \rangle + \frac{1}{2} \int n_{12} W_{12} d^3 r_1 d^3 r_2 \\ &= \int \mu_1 \frac{p_1^2}{2m} d^3 p_1 d^3 r_1 + \int n_1 \Phi_1 d^3 r_1 + \int d^3 r_1 n_1 \frac{1}{2n_1} \int n_{12} W_{12} d^3 r_2 \end{aligned}$$

relation qui conduit à définir la moyenne locale de l'énergie comme

$$(H_1)(M_1, t) = \left(\frac{p_1^2}{2m} \right) + \Phi_1 + \frac{1}{2n_1} \int n_{12} W_{12} d^3 r_2 \quad (1.63)$$

$$\text{de sorte que } \int (H_1) n_1 d^3 r_1 = \langle H \rangle$$

La grandeur $\frac{n_1}{N} d^3 r_1$ étant la probabilité de trouver une molécule dans $d^3 r_1$, la moyenne locale (H_1) peut éventuellement être interprétée comme l'énergie moyenne transportée par une seule molécule. Précisons ce point de vue. On a

$$\langle \frac{1}{2} \sum_{j=2}^N W_{1j} \rangle = \frac{N-1}{2} \int W_{12} D d\Omega = \frac{1}{2N} \int n_{12} W_{12} d^3 r_1 d^3 r_2$$

Ainsi,

$$\frac{\langle H \rangle}{N} = \langle \frac{p_1^2}{2m} \rangle + \langle \Phi_1 \rangle + \langle \frac{1}{2} \sum_{j=2}^N W_{1j} \rangle$$

Autrement dit, bien que l'énergie potentielle d'interaction entre molécules soit partagé, l'énergie potentielle W_{ij} , par exemple, étant commune aux molécules i et j , tout se

passe comme si l'on pouvait définir la part de l'énergie totale associée à une molécule comme

$$\tilde{H}_i = \frac{p_i^2}{2m} + \Phi_i + \frac{1}{2} \sum_{j \neq i} W_{ij} \quad (1.64)$$

en attribuant de cette manière, de façon arbitraire mais équitable, la moitié de W_{ij} à chacune des molécules i et j . En outre, on a

$$\begin{aligned} \int \tilde{H}_1 D d^3 p_1 d\Omega_2 \cdots d\Omega_N &= \int \frac{\mu_1}{N} \frac{p_1^2}{2m} + \int d^3 p_1 \frac{\mu_1}{N} \Phi_1 + \frac{N-1}{2} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \frac{\mu_{12}}{N(N-1)} W_{12} \\ &= \frac{1}{N} \left[n_1 \left(\frac{p_1^2}{2m} \right) + n_1 \Phi_1 + \frac{1}{2} \int n_{12} W_{12} d^3 r_2 \right] = \frac{n_1}{N} (H_1) \end{aligned}$$

ce qui justifie de considérer (H_1) comme la moyenne locale de \tilde{H}_1 , énergie par molécule.

Ecrivons maintenant

$$\frac{\partial}{\partial t} [n_1(H_1)] = \int \left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] \frac{\partial \mu_1}{\partial t} d^3 p_1 + \int \mu_1 \frac{\partial \Phi}{\partial t} d^3 p_1 + \frac{1}{2} \int W_{12} \frac{\partial n_{12}}{\partial t} d^3 r_2$$

et effectuons les calculs pas à pas.

a) Terme $X_1 = \int \left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] \frac{\partial \mu_1}{\partial t} d^3 p_1$

On utilise (1.47) :

$$\begin{aligned} X_1 &= - \int d^3 p_1 \left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] \left\{ \left[\frac{1}{m} \vec{p}_1 \cdot \vec{\nabla}_{r_1} + \vec{F}_1 \cdot \vec{\nabla}_{p_1} \right] \mu_1 + \int \vec{F}_{12} \cdot \vec{\nabla}_{p_1} \mu_{12} d\Omega_2 \right\} \\ &\equiv - \operatorname{div}_{r_1} \left\{ \int d^3 p_1 \frac{\vec{p}_1}{m} \left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] \mu_1 \right\} + \int d^3 p_1 \mu_1 \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \vec{\nabla}_{r_1} \left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] \\ &\quad + \vec{F}_1 \cdot \int d^3 p_1 \mu_1 \vec{\nabla}_{p_1} \left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] + \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \vec{F}_{12} \cdot \vec{\nabla}_{p_1} \left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] \\ &= - \operatorname{div}_{r_1} \left\{ \int d^3 p_1 \frac{\vec{p}_1}{m} \left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] \mu_1 \right\} + \int d^3 p_1 d\Omega_2 \vec{F}_{12} \cdot \frac{\vec{p}_1}{m} \mu_{12} \end{aligned}$$

b) Terme $X_2 = \int \mu_1 \frac{\partial \Phi}{\partial t} d^3 p_1$

$$X_2 = n_1 \frac{\partial \Phi}{\partial t}$$

c) Terme $X_3 = \frac{1}{2} \int W_{12} \frac{\partial n_{12}}{\partial t} d^3 r_2$

De (1.48) on tire

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_{12}}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \int d^3 p_1 d^3 p_2 \mu_{12} \equiv - \int d^3 p_1 d^3 p_2 \left[\frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \vec{\nabla}_{r_1} \mu_{12} + \frac{\vec{p}_2}{m} \cdot \vec{\nabla}_{r_2} \mu_{12} \right] \\ &= - \operatorname{div}_{r_1} \left\{ \int d^3 p_1 d^3 p_2 \mu_{12} \frac{\vec{p}_1}{m} \right\} - \operatorname{div}_{r_2} \left\{ \int d^3 p_1 d^3 p_2 \mu_{12} \frac{\vec{p}_2}{m} \right\} \end{aligned}$$

Puis, toujours dans l'hypothèse d'un système fermé,

$$\begin{aligned} X_3 &\equiv - \frac{1}{2} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \left[\operatorname{div}_{r_1} \left[\frac{\vec{p}_1}{m} W_{12} \mu_{12} \right] - \mu_{12} \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \vec{\nabla}_{r_1} W_{12} \right] \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \frac{\vec{p}_2}{m} \cdot \vec{\nabla}_{r_2} W_{12} \end{aligned}$$

D'où

$$\begin{aligned} X_1 + X_2 + X_3 &= - \operatorname{div}_{r_1} \left\{ \int d^3 p_1 \frac{\vec{p}_1}{m} \left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] \mu_1 \right\} + \int d^3 p_1 d\Omega_2 \vec{F}_{12} \cdot \frac{\vec{p}_1}{m} \mu_{12} \\ &\quad + n_1 \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \operatorname{div}_{r_1} \left\{ \frac{1}{2} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \frac{\vec{p}_1}{m} W_{12} \mu_{12} \right\} \\ &\quad + \frac{1}{2} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \vec{\nabla}_{r_1} W_{12} + \frac{1}{2} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \frac{\vec{p}_2}{m} \cdot \vec{\nabla}_{r_2} W_{12} \\ &= - \operatorname{div}_{r_1} \left\{ \int d^3 p_1 \frac{\vec{p}_1}{m} \left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] \mu_1 + \frac{1}{2} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \frac{\vec{p}_1}{m} W_{12} \mu_{12} \right\} + n_1 \frac{\partial \Phi}{\partial t} \\ &\quad + \frac{1}{2m} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \vec{F}_{12} \cdot [\vec{p}_1 + \vec{p}_2] \end{aligned}$$

Introduisons alors les écarts $\vec{Q}_1 = \vec{p}_1 - (\vec{p}_1)$, $\vec{Q}_2 = \vec{p}_2 - (\vec{p}_2)$. On a

$$\int d^3 p_1 \frac{(\vec{p}_1)}{m} \left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] \mu_1 = n_1 \vec{V}_1 \left(\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right)$$

$$\frac{1}{2} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \frac{(\vec{p}_1)}{m} W_{12} \mu_{12} = n_1 \vec{V}_1 \frac{1}{2n_1} \int d^3 r_2 n_{12} W_{12}$$

et donc

$$\int d^3 p_1 \frac{(\vec{p}_1)}{m} \left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] \mu_1 + \frac{1}{2} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \frac{(\vec{p}_1)}{m} W_{12} \mu_{12} = n_1 \vec{V}_1 (H_1)$$

Compte tenu de (1.49), on obtient ainsi

$$n_1 \frac{D(H_1)}{Dt} = n_1 \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \text{div}_{r_1} \left\{ \int d^3 p_1 \frac{\vec{Q}_1}{m} \left[\left[\frac{p_1^2}{2m} + \Phi_1 \right] \mu_1 + \frac{1}{2} \int d\Omega_2 W_{12} \mu_{12} \right] \right\}$$

$$+ \frac{1}{2m} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \vec{F}_{12} \cdot \left[\vec{p}_1 + \vec{p}_2 \right]$$

Intéressons-nous au second terme du second membre de cette dernière relation. Ecrivons $p_1^2 = (p_1)^2 + 2(\vec{p}_1) \cdot \vec{Q}_1 + Q_1^2$. On a

$$\int d^3 p_1 \mu_1 \vec{Q}_1 \left[\frac{(p_1)^2}{2m} + \Phi_1 \right] = \left[\frac{(p_1)^2}{2m} + \Phi_1 \right] \int d^3 p_1 \mu_1 \vec{Q}_1, \quad \text{et}$$

$$\int d^3 p_1 \mu_1 \vec{Q}_1 = \int d^3 p_1 \mu_1 \left[\vec{p}_1 - (\vec{p}_1) \right] = n_1 (\vec{p}_1) - (\vec{p}_1) n_1 = \vec{0}$$

De ce terme il reste donc les composantes

$$\frac{1}{2m^2} \int d^3 p_1 \mu_1 Q_{1a} \left[2Q_{1b} (\vec{p}_1)_b + Q_1^2 \right] = V_{1b} n_1 \frac{(Q_{1a} Q_{1b})}{m} + \frac{n_1}{2m^2} (Q_{1a} Q_1^2)$$

qui fait intervenir le tenseur de pression cinétique K_{1ab} . On a maintenant

$$\frac{1}{2m} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \vec{F}_{12} \cdot \left[\vec{p}_1 + \vec{p}_2 \right] = \frac{1}{2m} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \vec{F}_{12} \cdot \left[(\vec{p}_1) + (\vec{p}_2) \right]$$

$$+ \frac{1}{2m} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \vec{F}_{12} \cdot \left[\vec{Q}_1 + \vec{Q}_2 \right] = \frac{1}{m} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \vec{F}_{12} \cdot (\vec{p}_1) \quad (1.65)$$

$$+ \frac{1}{2m} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \vec{F}_{12} \cdot [(\vec{p}_2) - (\vec{p}_1)] + \frac{1}{2m} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \vec{F}_{12} \cdot [\vec{Q}_1 + \vec{Q}_2]$$

Le premier terme de la dernière expression est

$$\frac{1}{m} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \vec{F}_{12} \cdot (\vec{p}_1) = \vec{V}_1 \cdot \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \vec{F}_{12} = \vec{V}_1 \cdot n_1 \vec{F}_1 = -V_{1a} \partial_b p_{1ab}$$

Examinons le second terme. Ecrivons

$$(p_2)_a - (p_1)_a = \int_1^2 \vec{d\ell} \cdot \vec{\nabla} (p_a)$$

et choisissons le parcours de (1) à (2) tel que $\vec{\ell} = \vec{r}_1 + u \vec{R}$ où $\vec{R} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1$. On a alors $d\vec{\ell} = du \vec{R}$. D'où

$$Y = \frac{1}{2m} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \mu_{12} \vec{F}_{12} \cdot [(\vec{p}_2) - (\vec{p}_1)] = \frac{1}{2m} \int d^3 R n_{12} \frac{1}{R} \frac{dW_{12}}{dR} R_a R_b \int_0^1 du \partial_b (p_a)$$

On voit apparaître ici un calcul similaire à celui conduisant à l'expression (1.34) de la pression inter-molécules. On pose $r_{1S} = uR$, $r_{2S} = (1-u)R$. Comme $dr_{1S} dr_{2S} = R du dR$, il vient

$$Y = \frac{1}{2m} \int_0^\infty dr_{2S} \int_0^\infty dr_{1S} \int_{4\pi} d\mathcal{O} n_{12} \frac{dW_{12}}{dR} R_a R_b \partial_b (p_a) (M_S)$$

Nous admettons que la vitesse hydrodynamique varie peu dans le domaine de portée des interactions entre molécules, et que l'on peut ainsi écrire

$$Y \simeq \partial_b V_{1a} \frac{1}{2} \int_0^\infty dr_{2S} \int_0^\infty dr_{1S} \int_{4\pi} d\mathcal{O} n_{12} \frac{dW_{12}}{dR} R_a R_b = -\partial_b V_{1a} p_{ab}$$

Passons enfin au troisième terme de (1.65). Introduisons le vecteur

$$\vec{\xi} = \int d^3 p_1 d\Omega_2 \vec{R} \vec{F}_{12} \cdot [\vec{Q}_1 + \vec{Q}_2] \mu_{12} \quad \text{où} \quad \vec{R} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 \quad (1.66)$$

On a

$$\text{div}_1 \vec{\xi} = \int d^3 p_1 d\Omega_2 \left\{ \vec{R} \cdot \vec{\nabla}_1 \left[\vec{F}_{12} \cdot [\vec{Q}_1 + \vec{Q}_2] \mu_{12} \right] - 3 \vec{F}_{12} \cdot [\vec{Q}_1 + \vec{Q}_2] \mu_{12} \right\}$$

Pour aller plus loin, nous utiliserons deux ingrédients. D'une part, nous admettrons qu'une situation où deux molécules occupent la même position est certes envisageable, mais est improbable. Autrement dit la densité double μ_{12} doit être nulle si $\vec{r}_2 = \vec{r}_1$ ⁶. D'autre part, nous admettrons que les interactions entre molécules sont à très courte portée. Ceci fait que l'on pourra écrire approximativement

$$\left[\vec{F}_{12} \cdot \left[\vec{Q}_1 + \vec{Q}_2 \right] \mu_{12} \right] (\vec{r}_2) \simeq \vec{R} \cdot \vec{\nabla}_1 \left[\vec{F}_{12} \cdot \left[\vec{Q}_1 + \vec{Q}_2 \right] \mu_{12} \right] (\vec{r}_1)$$

Autrement dit, au second ordre près suivant l'écart \vec{R} , on a

$$\int d^3 p_1 d\Omega_2 \vec{F}_{12} \cdot \left[\vec{Q}_1 + \vec{Q}_2 \right] \mu_{12} \simeq -\frac{1}{2} \text{div}_1 \vec{\xi} \quad (1.67)$$

Ledit terme s'écrit donc lui aussi comme une divergence, en l'occurrence celle d'un vecteur. Collectons tous ces résultats en tenant compte de $K_{ab} + p_{ab} = P_{ab}$:

$$\boxed{n_1 \frac{D(H_1)}{Dt} = n_1 \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \partial_a [V_{1b} P_{ab}] - \text{div}_1 \vec{C}} \quad (1.68)$$

$$\text{avec } C_a = \frac{n_1}{2m^2} (Q_{1a} Q_1^2) + \frac{1}{2} \int d^3 p_1 d\Omega_2 \frac{Q_a}{m} W_{12} \mu_{12} + \frac{1}{4m} \xi_a$$

Dans l'équation (1.68), qui traduit la diffusion de l'énergie au sein du système, on voit apparaître

- un effet de variation temporelle du champ extérieur appliqué ;
- un terme décrivant le travail des forces de pression (contraintes), incluant la pression cinétique et la pression inter-molécules ;
- un terme qui ne correspond pas aux deux types d'action précédents et que, comme il est fait en Thermodynamique pour compléter le bilan énergétique, on attribue à la chaleur. Le vecteur \vec{C} représente ainsi le *flux de chaleur* se diffusant dans le système, dû principalement à des transferts d'énergie locaux par agitation thermique des molécules.

6. Dans le modèle courant de la théorie cinétique des gaz où les molécules sont assimilées à des sphères dures, la probabilité que les centres de deux sphères coïncident est considérée comme nulle.

1.10 Etablissement d'une équation bilan

Supposons que nous voulions étudier l'évolution temporelle d'une certaine grandeur physique \mathcal{E} . Le plus souvent, il s'agit d'une grandeur de caractère *extensif*. Soit alors $E(t)$ la quantité de cette grandeur contenue à la date t dans un volume *invariable* \mathcal{V} , appelé *volume de contrôle*. Une variation temporelle de $E(t)$ peut être due à de multiples causes physiques difficilement analysables d'une façon générale. Cependant, la description même de cette variation fait appel à un nombre restreint de concepts simples.

Tout d'abord, le caractère extensif de \mathcal{E} permet d'en définir une *densité volumique*, variable dans l'espace et dans le temps, que nous noterons $e(M, t)$. Ainsi, $E(t)$ s'exprime comme l'intégrale de volume

$$E(t) = \int_{\mathcal{V}} e(M, t) d\mathcal{V}(M)$$

L'étude d'une variation temporelle se fait de façon incontournable au moyen d'une dérivée temporelle. La grandeur à analyser au premier chef sera donc

$$\frac{dE}{dt}(t) = \int_{\mathcal{V}} \frac{\partial e}{\partial t}(M, t) d\mathcal{V}(M)$$

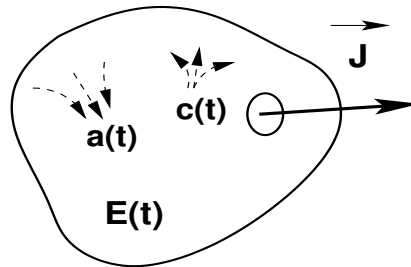


FIGURE 1.2 – Phénomènes associés à une équation bilan

La première cause de variation temporelle de $E(t)$ peut être due par une absorption, spontanée ou non, de la grandeur \mathcal{E} à l'intérieur même du volume \mathcal{V} . Nous tiendrons compte de cette possibilité en disant qu'à l'intérieur d'un volume élémentaire $d\mathcal{V}(M)$ autour d'un point M dans le volume \mathcal{V} disparaît par unité de temps une certaine quantité $a(M, t)d\mathcal{V}(M)$ de la grandeur \mathcal{E} . La deuxième cause de variation de $E(t)$ peut être due à des processus inverses de création, spontanée ou non elle aussi, de \mathcal{E} . Ce phénomène sera pris en compte en disant qu'une certaine quantité $c(M, t)d\mathcal{V}(M)$ de la grandeur \mathcal{E} peut apparaître par unité de temps dans le même élément de volume $d\mathcal{V}(M)$. Ce sont a priori les deux seuls phénomènes envisageables à l'intérieur du volume

\mathcal{V} . S'agissant de l'énergie, on peut imaginer par exemple une source locale d'émission de chaleur, ou de réfrigération. Ces sources peuvent être considérées comme faisant partie du système \mathcal{S} à l'intérieur de \mathcal{V} .

Une troisième cause de variation de $E(t)$ concerne l'interaction entre le système \mathcal{S} et le monde qui lui est extérieur, notamment l'inévitable réaction de l'univers face à cette variation. Cette dernière est conforme à un principe général de *modération*. Une valeur constante de E correspondrait à un certain équilibre naturel, forcé ou non. Une variation de cette quantité est consécutive à une rupture de cet équilibre. Dès lors sont mis en jeu des processus dont l'action vise à rétablir l'équilibre, ou de mener vers un nouvel équilibre, peut-être plus stable que le précédent et tenant compte des nouvelles contraintes. Du point de vue du système \mathcal{S} , ces processus d'interaction avec le monde extérieur se déroulent à sa frontière, c'est-à-dire en tous les points de la surface Σ délimitant le volume \mathcal{V} , appelée *surface de contrôle*. Il y a de plus un effet directionnel dans cette interaction. En effet, une diminution de $E(t)$ devrait conduire à une action orientée vers l'intérieur du volume visant à augmenter la quantité de \mathcal{E} qui y est contenue. L'action est inverse s'il s'agit d'une augmentation. Les caractéristiques de cette action sont bien prises en compte par une intégrale de flux. Ceci amène donc à définir un *vecteur densité de courant* dont le flux à travers la surface fermée Σ

$$\int_{\Sigma} \vec{J}(P, t) \cdot \vec{d\Sigma}(P)$$

décrit, par unité de temps, l'action ou la réaction du monde extérieur face à la variation de $E(t)$. En prenant soin d'affecter un signe "-" aux processus contrant une augmentation de $E(t)$, on établit ainsi l'équation intégrale du bilan :

$$\boxed{\frac{dE}{dt}(t) = \int_{\mathcal{V}} [c(M, t) - a(M, t)] d\mathcal{V}(M) - \int_{\Sigma} \vec{J}(P, t) \cdot \vec{d\Sigma}(P)} \quad (1.69)$$

D'après le théorème de Green-Ostrogradski, on sait que le flux d'un vecteur à travers une surface fermée peut être transformée en une intégrale de la divergence dudit vecteur dans le volume délimité par cette surface. Ceci oblige finalement à étendre à tout le volume \mathcal{V} notre modélisation de la réaction de l'univers à la variation de $E(t)$, c'est-à-dire d'accepter que \vec{J} existe même à l'intérieur de ce volume⁷. On en déduit l'équation

$$\int_{\mathcal{V}} \frac{\partial e}{\partial t}(M, t) d\mathcal{V}(M) = \int_{\mathcal{V}} [c(M, t) - a(M, t) - \text{div } \vec{J}(M, t)] d\mathcal{V}(M) \quad (1.70)$$

Celle-ci est finalement valable quelle que soit l'extension du volume. Passant à la limite d'un volume infinitésimal, on en déduit l'équation locale de bilan :

7. La réaction de l'univers contre une rupture d'équilibre est donc partout présente...

$$\boxed{\frac{\partial e}{\partial t}(M, t) + \operatorname{div} \vec{J}(M, t) = c(M, t) - a(M, t)} \quad (1.71)$$

Bien entendu, les expressions de g , a et \vec{J} sont spécifiques du système physique étudié, mais cette équation est de portée générale. Dans le cas où $c = 0$, $a = 0$, la variation de la grandeur \mathcal{E} ne peut qu'être due à un transfert de cette grandeur à travers la surface Σ . Ce transfert sera alors décrit au moyen d'un vecteur densité de courant de cette grandeur. Si \vec{V} est le champ des vitesses de son transport, on écrira

$$\vec{J}_e(M, t) = e(M, t) \vec{V}(M, t) \quad (1.72)$$

L'équation bilan devient

$$\boxed{\frac{\partial e}{\partial t}(M, t) + \operatorname{div} \vec{J}_e(M, t) = 0} \quad (1.73)$$

et l'on parle alors d'équation de conservation car globalement, la quantité de \mathcal{E} n'est pas détruite : à une diminution $dE(t)$ de $E(t)$ correspond un passage de la même quantité à travers Σ , vers l'extérieur. Le principe de conservation de la masse nous en fournit un exemple par l'équation (1.50) où $\vec{J} = \rho \vec{V}$ est le vecteur densité volumique de courant de masse qui s'exprime comme le produit de la densité volumique de masses en mouvement par la vitesse moyenne des molécules massives, et plus généralement comme une somme vectorielle de tels produits lorsque plusieurs espèces de molécules sont à considérer.

Supposons définie la moyenne locale (\mathcal{E}), *par molécule*, de la grandeur \mathcal{E} . On a alors $e = n(\mathcal{E})$ où n est la densité numérique⁸. Si le nombre de molécules est conservé, on dispose de l'équation de conservation (1.49) qui nous permet d'écrire

$$\frac{\partial e}{\partial t} = (\mathcal{E}) \frac{\partial n}{\partial t} + n \frac{\partial(\mathcal{E})}{\partial t} = n \frac{\partial(\mathcal{E})}{\partial t} - (\mathcal{E}) \operatorname{div} n \vec{V} = n \frac{\partial(\mathcal{E})}{\partial t} + n \vec{V} \cdot \vec{\nabla}(\mathcal{E}) - \operatorname{div} e \vec{V}$$

Définissons $\vec{J}' = \vec{J} - \vec{J}_e$. L'équation bilan (1.71) devient alors

$$\boxed{n \frac{D(\mathcal{E})}{Dt} + \operatorname{div} \vec{J}' = c - a} \quad (1.74)$$

où l'opérateur $\frac{D}{Dt}$ a été défini dans (1.56).

8. Nombre de molécules par unité de volume.

Supposons maintenant que l'on suive au cours de son mouvement une quantité de matière donnée, initialement contenue dans un volume \mathcal{V}_0 . A une date ultérieure, elle se trouve dans un volume \mathcal{V} . La variation au cours du temps de la quantité de la grandeur E qui lui correspond résulte non seulement des actions extérieures, mais aussi du fait que le volume \mathcal{V} qui la contient est variable dans le temps. Dans la durée infinitésimale δt , E varie de

$$\delta E = \int_{\mathcal{V}} [\delta e d\mathcal{V} + e\delta(d\mathcal{V})], \quad \text{avec} \quad \delta e = \delta t \frac{De}{Dt}$$

Ici intervient une dérivée totale par rapport au temps car chaque point du volume se déplace à la vitesse hydrodynamique qui lui correspond. Ainsi, $\delta x = V_x \delta t$, $\delta y = V_y \delta t$, $\delta z = V_z \delta t$. La variation du volume élémentaire $d\mathcal{V}$ est obtenue par

$$\begin{aligned} \delta(d\mathcal{V}) &= \delta(dx) \wedge dy \wedge dz + dx \wedge \delta(dy) \wedge dz + dx \wedge dy \wedge \delta(dz) \\ &= \delta t [dV_x \wedge dy \wedge dz + dx \wedge dV_y \wedge dz + dx \wedge dy \wedge dV_z] \\ &= \delta t d\mathcal{V} \left[\frac{\partial V_x}{\partial x} + \frac{\partial V_y}{\partial y} + \frac{\partial V_z}{\partial z} \right] = \delta t d\mathcal{V} \operatorname{div} \vec{V} \end{aligned} \quad (1.75)$$

Le taux de variation de E est dans ce cas

$$\boxed{\frac{\delta E}{\delta t} \equiv \frac{dE}{dt} = \int_{\mathcal{V}} \left[\frac{\partial e}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{J}_e \right] d\mathcal{V}} \quad (1.76)$$

Comme il se doit, le transport de E est déjà pris en compte, et la variation de E est due aux seules actions de \vec{J}' , c et a :

$$\frac{dE}{dt} = \int_{\mathcal{V}} d\mathcal{V} \left[-\operatorname{div} \vec{J}' + c - a \right] \quad (1.77)$$

Si on considère que la grandeur E est le nombre N de molécules contenues dans le volume ou la masse M qui y est contenue, on trouve bien sûr, en vertu des équations de conservation correspondantes, $\frac{\delta N}{\delta t} = 0$, $\frac{\delta M}{\delta t} = 0$.

1.11 Bilan d'énergie cinétique

En illustration du paragraphe précédent, établissons l'équation bilan de l'énergie cinétique d'un fluide en mouvement, considéré d'un point de vue mésoscopique comme un ensemble de particules fluides, chacune animée d'une vitesse égale à tout instant au champ de vitesse hydrodynamique au point où elle se trouve alors. Dans cette vision, on ignore

l'énergie cinétique d'agitation thermique microscopique. L'énergie cinétique envisagée est donc celle ayant pour densité volumique $e_c = \frac{1}{2}\rho V^2$. Au moyen des formules (1.50) et (1.54) on évalue

$$\begin{aligned}\frac{\partial e_c}{\partial t} &= \frac{V^2}{2} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \vec{V} \cdot \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} = -\frac{V^2}{2} \operatorname{div} [\rho \vec{V}] + \rho V_k \left[-V_\ell \partial_\ell V_k + f_k - \frac{1}{\rho} \partial_\ell P_{k\ell} \right] \\ &= -\operatorname{div} [\vec{V} e_c] + \rho \vec{V} \cdot \vec{f} - V_k \partial_\ell P_{k\ell}\end{aligned}$$

Introduisons le vecteur \vec{W} ayant pour composantes $W_\ell = V_k P_{k\ell}$. Il vient

$$\boxed{\frac{\partial e_c}{\partial t} + \operatorname{div} [\vec{V} e_c] = -\operatorname{div} \vec{W} + \rho \vec{V} \cdot \vec{f} + P_{k\ell} \partial_\ell V_k} \quad (1.78)$$

c'est-à-dire, une équation conforme à (1.71). Suivons une quantité donnée de fluide dans son mouvement. D'après (1.76) et (1.78), le taux de variation de son énergie cinétique E_c est

$$\frac{dE_c}{dt} = \int_{\mathcal{V}} d\mathcal{V} \rho \vec{V} \cdot \vec{f} - \int_{\mathcal{S}} d\mathcal{S} \vec{n} \cdot \vec{W} + \int_{\mathcal{V}} d\mathcal{V} P_{k\ell} \partial_\ell V_k$$

où \mathcal{S} est la surface, à l'instant donné, de ladite quantité de fluide. Interprétons chacun des termes du second membre.

- Le premier représente le travail par unité de temps des forces extérieures agissant sur la masse de fluide considérée.
- Le second, avec son signe, s'écrit

$$- \int_{\mathcal{S}} d\mathcal{S} n_k V_\ell P_{k\ell}$$

et représente le travail par unité de temps des forces de pression s'exerçant à la surface \mathcal{S} .

Chacun de ces deux termes peut être créateur ou destructeur d'énergie cinétique. Pour analyser le troisième terme, qui reste volumique, on décompose tout d'abord le tenseur de pression en une partie isotrope $\delta_{k\ell} P$ et une partie anisotrope $P'_{k\ell}$:

$$P_{k\ell} = P'_{k\ell} + \delta_{k\ell} P \quad (1.79)$$

où $P = \frac{1}{3} \operatorname{Tr}(P_{k\ell})$ est la *pression mécanique* au sein du fluide, à ne pas confondre avec la pression définie en Thermodynamique où les systèmes étudiés sont en équilibre thermodynamique. Ledit troisième terme se scinde alors en un terme :

$$\int_{\mathcal{V}} P \operatorname{div} \vec{V} d\mathcal{V}$$

qui représente encore un travail par unité de temps de la pression, lié à une variation de volume, voir (1.75), et un autre terme

$$\int_{\mathcal{V}} P'_{k\ell} \partial_{\ell} V_k d\mathcal{V}$$

associé à une anisotropie des contraintes $\sigma'_{k\ell} = -P'_{k\ell}$ provoquant des déformations du fluide que l'on décrit en terme de *viscosité* ainsi qu'il sera vu plus loin. Ce terme que, grâce à la symétrie du tenseur des contraintes on peut récrire sous la forme

$$-\frac{1}{2} \int_{\mathcal{V}} \sigma'_{k\ell} [\partial_{\ell} V_k + \partial_k V_{\ell}] d\mathcal{V}, \quad (1.80)$$

ne peut qu'être dissipateur d'énergie et donc *négalif* en toute circonstance. Avec la décomposition (1.79), et compte tenu de l'équation de diffusion de la quantité de mouvement (1.57), une masse de fluide donnée A voit sa quantité de mouvement \vec{P}_A varier au cours du temps selon

$$\begin{aligned} \frac{dP_{Ai}}{dt} &= \int_{\mathcal{V}} d\mathcal{V} \left[\frac{\partial \mathcal{P}_i}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{V} \mathcal{P}_i \right] \\ &= \int_{\mathcal{V}} d\mathcal{V} \rho f_i - \int_S dS n_i P - \int_S dS n_{\ell} P'_{i\ell} \end{aligned} \quad (1.81)$$

Les deux premiers termes de cette équation sont facilement identifiables comme étant, respectivement, la force totale due au champ extérieur, la force de pression mécanique agissant à la surface de A . Quant au troisième terme, il est associé à un transport irréversible de quantité de mouvement vers des zones où elle présente des déficits, et décrit en termes de viscosité (voir plus loin).