





Tous nos livres sont imprimés dans les règles  
environnementales les plus strictes

Il est interdit de reproduire intégralement ou partiellement la présente publication sans autorisation du Centre Français d'exploitation du droit de Copie (CFC) – 20 rue des Grands-Augustins – 75006 PARIS – Tél. : 01 44 07 47 70 / Fax : 01 46 34 67 19.



© Éditions Edilivre – Collection Universitaire – 2008  
ISBN : 978-2-35607-852-0  
Dépôt légal : Juillet 2008

Tous droits de reproduction, d'adaptation et de traduction,  
intégrale ou partielle réservés pour tous pays.





UNIVERSITÉ DE PROVENCE (AIX-MARSEILLE I)  
Institut Universitaire des Systèmes Thermiques Industriels  
C.N.R.S.-U.M.R. 6595

**THÈSE DE DOCTORAT**

*présentée par*

**S. E. Kokou DADZIE**

*pour obtenir le grade de*

**Docteur de l'Université de Provence**

Mention : Sciences

Spécialité : Mécanique Energétique

Ecole Doctorale Mécanique, Physique et Modélisation

*intitulée*

**Conditions aux limites dans un gaz raréfié: loi de réflexion à la paroi, saut de température, glissement de vitesse, couche de Knudsen**

Thèse soutenue le 14 Décembre 2005

Carlo CERCIGNANI	Rapporteur	Politecnico di Milano, Italy
Renée GATIGNOL	Rapporteur	Université Paris 6
Sergei BORISOV		Ural State University, Russia
Maria LAMPIS		Politecnico di Milano, Italy
Roger MARTIN		Université de Provence
Jean Claude LENGREND		Laboratoire d'Aérodynamique, Orléans
David ZEITOUN		Université de Provence
J. Gilbert MEOLANS	Directeur de thèse	Université de Provence

## **Conditions aux limites dans un gaz raréfié: loi de réflexion à la paroi, saut de température, vitesse de glissement, couche de Knudsen**

**Résumé** - Cette thèse aborde le problème de l'interaction gaz/paroi et des conditions aux limites en écoulement de gaz raréfié. Les écoulements dans les microsystèmes et les écoulements autour des engins spatiaux en rentrée atmosphérique ont démontré l'insuffisance des concepts utilisés dans la formulation des conditions aux limites hydrodynamiques existantes. Dans ce travail, nous avons élaboré, dans un premier temps, des modèles de conditions aux limites cinétiques, en développant de manière originale la théorie de "scattering kernel" bien connue dans le domaine de la recherche de conditions aux limites de l'équation de Boltzmann. Ces modèles sont développés d'une part pour un gaz monoatomique et d'autre part pour un gaz de molécules complexes. Les démonstrations font appel à des formulations intégrales et à une description basée sur la théorie des opérateurs. Elles introduisent la notion de coefficient d'accommodation propre à chaque degré de liberté. Dans un deuxième temps nous avons utilisé ces conditions aux limites cinétiques pour établir des conditions aux limites hydrodynamiques : saut de température - glissement de vitesse. Nous abordons également le problème de la couche limite cinétique (couche de Knudsen) et de la prédiction du flux de chaleur à la paroi. Finalement ces conditions aux limites sont utilisées pour les calculs de coefficients aérodynamiques et de quelques types d'écoulements particuliers. Les résultats sont comparés à ceux donnés par d'autres modèles, ainsi qu'aux résultats expérimentaux.

**Mots-clés** : interaction gaz paroi, scattering kernel, couche de Knudsen, saut de température, vitesse de glissement, théorie cinétique des gaz, Equation de Boltzmann, conditions aux limites

## **Boundary conditions in rarefied gas flows: scattering kernel, temperature jump, slip velocity, Knudsen layer problem**

**Abstract** - This thesis deals with the problem of gas/wall interaction and boundary conditions in rarefied gas flows. Recent developments in microsystems and atmospheric re-entry flight let appear new flow fields where boundary conditions are very important. These boundary conditions should be basically derived from gas kinetic theory. During this thesis, we developed a model of kinetic boundary conditions for unstructured and structured molecules gas flows in the gas surface interaction topic. The proposed kinetic boundary conditions were based on some mathematical integral formulations of the problem, supported by phenomenological descriptions. Then, the kinetic boundary conditions were used to describe hydrodynamic boundary conditions through the problem of temperature jump and slip velocity at the solid body. The Knudsen layer (which is a thin layer close to the wall) is also briefly described. Finally, the proposed kinetic boundary conditions are used in drag coefficient calculations, for higher altitude hypersonic flows in the free molecular regime, and in some particular flow predictions. Comparisons are made with other models and experiments.

**Keywords** : gas surface interaction, scattering kernel, Knudsen layer, slip velocity, temperature jump, slip flow, gas kinetic theory, Boltzmann equation

# Remerciements

Au terme de ces trois années de thèse au sein du Laboratoire de l'IUSTI, je tiens en premier lieu à remercier le Directeur, Monsieur *Roger Martin*, qui a également été le président mon de Jury, de m'avoir accueilli dans cette unité de recherche. J'ai pu ainsi profiter à loisir de l'expérience de l'ensemble des chercheurs ainsi que de l'ambiance très conviviale du Laboratoire.

Mes plus sincères remerciements vont à mon Directeur de thèse Monsieur *J. Gilbert Méolans* pour le bel encadrement de ma thèse et surtout pour sa présence quasi permanente à mes côtés. J'ai beaucoup appris dans le domaine très délicat de la théorie cinétique des gaz. Nos discussions ont toujours été une source d'enrichissement personnel. De part l'entière liberté d'action et de pensée qu'il m'a laissée j'ai également beaucoup appris sur ce que doivent être la vision et les motivations profondes du chercheur.

Mes plus vifs remerciements vont au Professeur *Carlo Cercignani* et au Professeur *Renée Gatignol*, qui m'ont fait l'honneur d'être rapporteurs de ces travaux, ainsi qu'à tous les autres membres qui ont bien voulu accepter de participer à mon jury de soutenance, le Professeur *Sergei Borisov* et le Professeur *Maria Lampis*. Je souhaite également exprimer ma gratitude envers toute l'équipe qui travaille sur les Milieux Hors Equilibre (M.H.E.Q.), dont je faisais parti : en premier lieu son responsable Monsieur *David Zeitoun*, ainsi que tous les autres membres notamment *Irina Graaur*, *Pierre Perrier*, *Jean-Luc Firpo*, *Yves Burtchell* et *Marie Claude Druguet*, avec qui j'ai eu des échanges et qui m'ont beaucoup soutenu durant ces trois années.

Un grand salut à mon grand ami *Jean-Philippe Bonnet*. Je n'oublie pas mes premiers compagnons de route dans l'aventure de la thèse : *Stéphanie Nicolas*, *Magali Barthes*, *Cyril Cassar*. Une petite pensée pour nos prédécesseurs en particulier *Christophe Sierra*.

Je ne peux m'empêcher dans ces remerciements d'adresser un petit mot à l'égard de toute la " Dream Team " des apéros et des grands moments : *Guillaume Layes* (avec son bar à cocktails inoubliable), *Timothé Ewart*, *Jacqueline Barber*, *Nicolas Sardoin*, *Laura Grandas*, *Guillaume Périgaud*, *Anne Lenoble*, *Christian Mariani*, *Erwin Franquin* et tous les autres.

Pour finir je pense à mes amis de toujours que la distance n'a jamais empêchés d'être toujours présents en particulier *Samba Bah*, *Yacine Bentaleb* et *Espoir Datchidji*.

# Contenu du document

Nomenclature	4
Introduction	6
A brief English version	9
<b>1 Généralités et état de l'art</b>	<b>13</b>
1.1 L'équation de Boltzmann et ses techniques d'approche	13
1.1.1 L'équation de Boltzmann	13
1.1.2 Les méthodes d'approche de l'équation de Boltzmann	14
1.1.3 Remarque sur les modèles cinétiques	17
1.2 Conditions aux limites pour l'équation de Boltzmann	17
1.2.1 La question de l'interaction gaz/paroi	17
1.2.2 Principaux modèles de conditions aux limites cinétiques	19
1.3 Le problème de la couche de Knudsen	21
1.3.1 Saut de température chez Welander, $\Delta T = T'_{Kn} - T_w$	23
1.3.2 Saut de temperature chez Gupta et al., $\Delta T = T_{Kn} - T_w$	24
1.3.3 Autres conceptions des notions de discontinuités pariétales	24
1.4 Définition du saut de température et de la vitesse de glissement adoptée dans cette étude	25
1.5 Conclusion	26
<b>2 Conditions aux limites cinétiques</b>	<b>28</b>
2.1 La théorie du scattering kernel	28
2.1.1 Conditions requises pour tout scattering kernel	29
2.2 Descriptions phénoménologiques	30
2.2.1 Le modèle de Maxwell	30
2.2.2 La modification d'Epstein	31
2.2.3 Nouvelle description phénoménologique	32
2.3 Construction systématique de l'opérateur de réflexion	34
2.3.1 Formulation intégrale	34
2.3.2 Une démarche spectrale basée sur les degrés de liberté	35
2.4 Les coefficients $\alpha_j$ et les coefficient $\mu_\kappa$	40
2.4.1 Les coefficients $\alpha_j$	40
2.4.2 les coefficients $\mu_\kappa$ et le coefficient de Maxwell $\alpha$	42
<b>3 Généralisation de la construction du scattering kernel</b>	<b>43</b>
3.1 Conditions aux limites pour les gaz polyatomiques	43
3.1.1 Formulation du problème	43



3.1.2	Formulation intégrale généralisée . . . . .	44
3.1.3	Une méthode de construction systématique . . . . .	45
3.1.4	Identification des cinq coefficients $\alpha_\chi$ . . . . .	47
3.1.5	Le coefficient d'accommodation de l'énergie de translation . . . . .	49
3.2	Autre expression de l'opérateur de réflexion : opérateurs élémentaires . . . . .	50
3.3	Opérateurs de réflexion sur des surfaces isotropes . . . . .	51
3.4	Commentaires : . . . . .	51
3.4.1	sur la méthode de description spectrale en théorie du scattering kernel	51
3.4.2	sur les coefficients d'accommodation constants . . . . .	52
<b>4</b>	<b>Conditions aux limites hydrodynamiques</b>	<b>53</b>
4.1	Flux de chaleur et température du gaz au contact d'une paroi . . . . .	53
4.1.1	Méthode pour la température au contact de la paroi . . . . .	54
4.1.2	Conditions aux limites sur la température . . . . .	55
4.1.3	Analyse de la condition aux limites sur la température . . . . .	56
4.1.4	Analyse dimensionnelle dans des configurations particulières . . . . .	57
4.2	Vitesse macroscopique du fluide au contact de la paroi . . . . .	61
4.2.1	Calcul de la vitesse de glissement . . . . .	61
4.2.2	Forme simplifiée de la vitesse de glissement . . . . .	63
4.2.3	Vitesse de glissement sur une surface spéculaire . . . . .	64
4.2.4	Analyse dimensionnelle de la vitesse de glissement . . . . .	64
4.3	Correction de la couche de Knudsen sur les relations de discontinuité . . . . .	66
4.3.1	Couche de Knudsen comme une zone de très forts gradients . . . . .	66
4.3.2	Les relations de saut de second ordre . . . . .	67
4.4	Saut de températures dans un gaz polyatomique . . . . .	68
4.4.1	Paramètres généraux des modèles cinétiques pour gaz polyatomiques	68
4.4.2	Cas où un seul mode interne est excité . . . . .	69
4.4.3	Cas de plusieurs modes internes dont l'un en déséquilibre . . . . .	75
<b>5</b>	<b>Applications : quelques exemples particuliers</b>	<b>76</b>
5.1	Longueur de glissement et coefficient de glissement . . . . .	76
5.1.1	Définitions et expressions . . . . .	76
5.1.2	Comparaison avec les coefficients de glissement expérimentaux . . . . .	77
5.2	Le problème d'inversion de profil en écoulement de Couette cylindrique . . . . .	78
5.2.1	L'inversion de profil avec une loi de réflexion de type Maxwell . . . . .	79
5.2.2	Les profils avec la nouvelle loi de réflexion . . . . .	81
5.3	Coefficients aérodynamiques des satellites artificiels . . . . .	82
5.3.1	Le coefficient de traînée et le coefficient de portance . . . . .	83
5.3.2	Dépendance des coefficients d'accommodation par rapport à l'angle d'attaque . . . . .	88
5.4	conclusion . . . . .	89
	<b>Conclusions générales et perspectives</b>	<b>91</b>
	<b>Annexes</b>	<b>96</b>
	<b>Références bibliographiques</b>	<b>104</b>
	<b>Les articles issus de ce mémoire</b>	<b>111</b>

# Nomenclature

$x, y, z$	les trois composantes de l'espace cartésien, $x$ la normale à la paroi orientée de la paroi vers le gaz
$X$	un point de l'espace physique : $X \equiv (x, y, z)$
$\alpha$	coefficient d'accommodation unique du modèle d'interaction gaz/paroi de Maxwell
$\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$	les trois coefficients d'accommodation des trois composantes de la quantité de mouvement
$\sigma_0$	$\sigma_0 = (\alpha_x + \frac{1}{2}(\alpha_y + \alpha_z))$
$\sigma_1$	$\sigma_1 = (3\alpha_x + \alpha_y + \alpha_z)$
$m$	masse molaire d'une particule gazeuse
$n$	densité numérique : $n \equiv n(x, y, z)$
$\mu$	viscosité dynamique
$k$	constante de Boltzmann
$T$	température du gaz prise en un point quelconque $(x, y, z)$
$T_w$	température de la paroi
$U_w$	vitesse de la paroi
$T_0$	température du gaz prise au contact de la paroi, $T_0 \equiv T(x = 0, y, z)$
$\lambda_m$	libre parcours moyen, $\lambda_m = \frac{\mu}{mn} \sqrt{\frac{m\pi}{2kT}}$
$C_w, C_0, C$	désignent respectivement, $\sqrt{\frac{2kT_w}{m}}$ ; $\sqrt{\frac{2kT_0}{m}}$ ; $\sqrt{\frac{2kT}{m}}$
$f$	fonction de distribution des particules
$\xi(\xi_x, \xi_y, \xi_z)$	vitesse réelle d'une particule.
$U(U_x, U_y, U_z)$	vitesse macroscopique du gaz
$V(V_x, V_y, V_z)$	vitesse d'agitation d'une particule gaz, $\xi = V + U$
$V^2, U^2, \xi^2, \dots$	désigne le carré du module des vitesses $V, U, \xi \dots$
$\Omega$	$]0; \infty; [\times] - \infty; +\infty[\times] - \infty; +\infty[$
$\Omega'$	$] - \infty; 0[\times] - \infty; +\infty[\times] - \infty; +\infty[$
$Kn$	nombre de Knudsen égale au libre parcours moyen divisé par une dimension caractéristique
$Ma$	nombre de Mach,
$\lambda_c$	conductivité thermique
$\sigma_v$	coefficient de glissement
$\vec{Q}$	vecteur flux de chaleur
$\zeta_0$	longueur de glissement
$\sigma_v$	coefficient de glissement, $\zeta_0 = \sigma_v \lambda_m$
$\delta$	fonction (ou distribution) de Dirac
$\mathbb{I}$	tenseur identité d'ordre 2
$V'_i V'_j$	tenseur d'ordre 2 formé par les produits $V'_i \times V'_j$
$\frac{\partial U_i}{\partial X_j}$	tenseur d'ordre 2 formé par les éléments $\frac{\partial U_i}{\partial X_j}$

## Au contact de la paroi, $x = 0$

$f^-$	fonction de distribution des particules incidentes
$f^+$	fonction de distribution des particules réfléchies
$\xi', V', ..$	vitesse des particules incidentes : $\xi'_x < 0$ , $V'_x < 0$
$\xi, V, ..$	vitesse des particules réfléchies à la paroi : $\xi_x > 0$ , $V_x > 0$
$\xi_R, V_R, ..$	vecteurs vitesses de composantes $(-\xi_x, \xi_y, \xi_z)$ , $(-V_x, V_y, V_z)$ , ..

## Les maxwelliennes

$F$  distribution maxwellienne définie par la fonction,  
$$F = \frac{n}{(\sqrt{\frac{2kT}{m}}\pi)^3} e^{-\frac{m(\xi-U_F)^2}{2kT_F}}$$
, où  $U_F$  et  $T_F$  sont la vitesse macroscopique et la température qui caractérisent cette maxwellienne.

$F^0$  maxwellienne à la température et à la vitesse du gaz :  $U_F = U$  du gaz et  $T_F = T$  du gaz

$F_0$  maxwellienne à la température du gaz au contact de la paroi :  $U_F = U(x=0, y, z)$  et  $T_F = T_0$

$F_w$  maxwellienne à la température de la paroi :  $T_F = T_w$

## Les notations en gaz polyatomique

$F_i$	distribution de Maxwell-Boltzmann hors équilibre ( voir page 70 et page 44)
$F_{i_w}$	distribution de Maxwell-Boltzmann à une seule température $T_w$ de la paroi ( voir page 44)
$f_i$	fonction de distribution des particules
$f_i^-$	fonction de distribution des particules incidentes à la paroi
$f_i^+$	fonction de distribution des particules réfléchies à la paroi
$T_t$	température de translation
$T_r$	température de rotation
$T_v$	température de vibration
$\alpha_r$	coefficient d'accommodation de l'énergie de rotation
$\alpha_v$	coefficient d'accommodation de l'énergie de vibration
$\lambda_t$	conductivité thermique du mode de translation
$\lambda_r$	conductivité thermique du mode de rotation
$\lambda_v$	conductivité thermique du mode de vibration
$E_{i_r}$	énergie interne de rotation des particules gazeuses
$E_{i_v}$	énergie interne de vibration des particules gazeuses
$E_r(T_r)$	énergie moyenne de rotation à la température de rotation $T_r$
$E_v(T_v)$	énergie moyenne de vibration à la température de vibration $T_v$
$E_{r_w} = E_r(T_w)$	énergie moyenne de rotation pour $T_r = T_w$
$E_{v_w} = E_v(T_w)$	énergie moyenne de vibration pour $T_v = T_w$
$Q_r(T_t)$	voir page 68
$Q_v(T_v)$	voir page 68
$Q_r(T_w)$	voir page 44
$Q_v(T_w)$	voir page 44
$C_v^r, C_v^v$	chaleur spécifique de rotation et chaleur spécifique de vibration

## Introduction

La recherche fondamentale concernant l'interaction des gaz avec des surfaces solides et les propriétés des écoulements autour de ces surfaces a commencé à la fin du XIX<sup>ème</sup> siècle. Mais c'est au cours des quarante dernières années qu'apparaît un besoin urgent de développer et de préciser ces connaissances. Ce besoin se manifeste d'abord dans le domaine de la recherche spatiale pour des écoulements à très grandes vitesses, au sujet du calcul des coefficients aérodynamiques (coefficient de traînée, etc.), ou encore au sujet de la description de l'évolution des flux de chaleur pariétaux. Avec l'explosion de la microfluidique des MEMS, ces vingt dernières années écoulées ont vu s'ouvrir de nouveaux champs d'investigation où les effets de surface jouent un rôle prépondérant dans la détermination des écoulements ainsi que dans la détermination des phénomènes de transfert de chaleur et de masse. Il s'agit ici d'écoulements dans des micros conduits de diamètre hydraulique compris entre le micromètre et le millimètre, et dont la vitesse est souvent très faible devant la vitesse du son.

Les connaissances nécessaires pour traiter ces problèmes nouveaux relèvent d'abord du processus d'interaction des particules gazeuses avec la paroi, c'est-à-dire aussi des propriétés physico-chimiques des particules constituant respectivement le gaz et la surface solide. Même si l'on exclut toute réaction chimique (ce qui est le cas dans ce travail), le sujet demeure difficile et fait l'objet de controverses. Evidemment l'état de la surface au sens le plus général du terme joue aussi un rôle important au niveau de la réflexion à la paroi : on peut citer par exemple à cet égard, l'inclinaison du plan de la surface par rapport au réseau atomique constituant le solide, ou encore la rugosité de la paroi. Mais les nouvelles données recherchées concernent aussi les voisinages des parois solides limitant le champ de l'écoulement. On considère généralement que ces voisinages sont spatialement délimités par une longueur caractéristique de l'ordre de quelques libres parcours moyens : ainsi se trouve définie au contact de la surface solide, une couche mince appelée couche limite cinétique ou couche de Knudsen dans laquelle le nombre de Knudsen local est de l'ordre de 1. Dans ce champ de l'écoulement, les paramètres physiques du gaz sont gouvernés par des équations dont la structure est différente de celles utilisées loin de la paroi. Étant données les valeurs du nombre de Knudsen local, le système des équations continues de la mécanique des fluides ne s'applique plus, mise à part l'équation de continuité de la masse qui demeure valable. L'équation de Boltzmann, décrivant le comportement de la fonction de distribution des particules peut évidemment être utilisée. Mais la hiérarchie des ordres de grandeurs entre le terme de collision et le terme de transport n'est plus la même que celle qui existe loin de la paroi.

Malgré l'éventail des publications existant sur la couche de Knudsen et sur les problèmes de saut de température et de glissement de vitesse à la paroi, on peut affirmer que le problème de la formulation de conditions aux limites découlant de l'interaction gaz/paroi reste encore très ouvert et que les résultats obtenus jusqu'ici sont encore loin d'être satisfaisants. De ce fait, le premier chapitre de ce mémoire, principalement consacré à la bibliographie, ne constitue pas une liste exhaustive des travaux antérieurs. Il est plutôt présenté sous la forme d'un aperçu des fondements des approches existant dans la littérature dont on mettra surtout en évidence les insuffisances fondamentales. Comme on le verra dans cette partie, de profondes divergences existent encore suivant les auteurs au niveau même de l'interprétation et de la définition de certaines notions de base. Ainsi par exemple, la définition théorique du saut de température n'est pas toujours la même, et la couche de

Knudsen n'est pas toujours l'objet des mêmes interprétations dans tous les travaux. Ces divergences sur les définitions premières illustrent bien le fait que la connaissance de ce sujet est encore à l'état fragmentaire. Ainsi cette première partie contribuera aussi à éclaircir les concepts sur lesquels sont basées les études développées dans la suite du mémoire. Compte tenu de la distinction que nous y opérons entre le concept de couche de Knudsen et les notions de discontinuités pariétales, l'étude de la couche de Knudsen proprement dite ne sera abordée qu'assez succinctement dans ce travail dont l'objectif principal est la modélisation de la réflexion à la paroi, en d'autre terme la modélisation des conditions aux limites au niveau microscopique.

Le deuxième chapitre est consacré à la construction d'un nouvel opérateur noyau de réflexion des particules à la paroi, dans le cas d'un gaz simple. Il commence par le rappel et l'analyse des conditions physiques que doit satisfaire un opérateur noyau de réflexion, notamment la condition d'équilibre thermodynamique de la paroi connue sous le nom de " relation de réciprocité ". Sur le plan technique, la construction passe par la définition d'un opérateur intégral associé au " scattering kernel ", [introduite par Cercignani]. Les conditions requises pour un opérateur de réflexion à la paroi (le scattering kernel) sont ensuite traduites dans ce formalisme d'opérateur intégral. L'originalité du travail réside ici dans le traitement qui est fait de ce formalisme à partir de la discussion de la nature spectrale de l'opérateur intégral. Ce traitement diffère de ceux qui conduisent aux modèles précédents basés sur le formalisme du " scattering kernel " et l'on aboutit ainsi à un modèle qui s'écarte des modèles existants. Notre nouvelle description relie les propriétés cinétiques des particules interagissant avec la paroi aux propriétés spectrales de l'opérateur intégral. Les propriétés cinétiques décrivant l'état des particules sont les trois composantes de la quantité mouvement dans le cas d'un gaz monoatomique, auxquelles s'ajoutent les divers énergies internes (vibration, rotation, etc.) dans le cas des gaz polyatomiques ou complexes.

Le troisième chapitre est précisément consacré à la généralisation de la construction des opérateurs noyaux de réflexion à la paroi dans le cas des gaz de molécules complexes.

Dans le quatrième chapitre nous traitons du problème des sauts de température et de vitesse de glissement. Nous introduisons dans cette partie une méthodologie assez concise pour calculer le saut de température et la vitesse de glissement. Dans le cas précis de nos calculs, nous choisissons, pour décrire les molécules incidentes, une fonction de distribution conduisant aux équations de Navier Stokes. Mais la méthodologie exposée reste entièrement ouverte à l'introduction d'autres formes de modélisation de la fonction de partition des particules près de la paroi : par exemple une fonction de partition modifiée à travers la couche de Knudsen ou encore une fonction de partition pouvant conduire aux relations de saut d'ordre supérieur. Les limites de validité des premières relations de saut, obtenues par ce type de calcul, seront donc discutées. A la fin de ce chapitre, nous discutons de quelques corrections schématiques que l'on peut apporter à nos résultats pour prendre grossièrement en compte l'influence de la couche de Knudsen.

Le chapitre cinq est consacré au traitement de certains problèmes particuliers devant lesquels les modélisations courantes des conditions aux limites sont directement mises en question. Cela nous permet de discuter quelques résultats pratiques issus de nos modélisations. Nous abordons ainsi les questions de l'expression théorique et des valeurs expérimentales de la longueur de glissement, où l'on verra que les expressions nouvelles

conduisent à des résultats beaucoup plus réalistes que certains modèles classiques. Nous abordons ensuite un problème récent, connu sous le nom de "problème d'inversion des profils de vitesses en écoulement de Couette cylindrique". Dans cet exemple, nous verrons que la nouvelle description ne conduit pas au phénomène d'inversion des profils qui apparaît ainsi liée au modèle de description classique (i.e. au modèle de Maxwell.)

Nous traitons enfin du problème de la prédiction des coefficients aérodynamiques dans le régime moléculaire libre, qui concerne les écoulements autour des satellites artificiels en orbites circumterrestres.

Le manuscrit se termine sur une partie de conclusions générales et de perspectives, dans lesquelles nous présentons quelques voies possibles pour aborder plus rigoureusement, et plus complètement, l'ensemble du problème de la réflexion et de l'écoulement au voisinage immédiat de la paroi. Nous insistons surtout sur certains aspects de la couche Knudsen que les modélisations existantes prennent très peu en compte, et qui n'ont pas été traitées dans ce mémoire.

En résumé, le premier chapitre se présente comme une analyse des approches existant dans la littérature et une clarification conceptuelle préalable à notre étude. Les chapitres suivants sont consacrés aux nouveaux résultats obtenus durant ces trois années. Dans la conclusion du mémoire on suggère des méthodes différentes pour aborder et traiter l'ensemble du problème couche de Knudsen/paroi.

#### Remarque

1. Dans ce manuscrit, certaines notations sont volontairement redéfinies aux emplacements où elles interviennent dans le but de rendre plus facile la lecture du document. C'est le cas notamment des notations figurant dans le Chapitre 3.
2. Pour alléger les présentations et faciliter la compréhension des modes opératoires de certaines démarches dans le document, bon nombre de calculs intermédiaires, qui sont très longs mais qui ne présentent aucune difficulté majeure, sont renvoyés dans les Annexes. Toutefois les résultats de ces calculs intermédiaires figurent dans le document principal.

## A brief English version

Fundamental research on gas/surface interactions and on gas flows close to walls started in the late nineteenth century. But it is during the last forty years, that has arisen an urgent need for increased knowledge, especially in the spatial domain, for calculation of the aerodynamic coefficients (e.g. drag coefficients) and for prediction of heat fluxes around surfaces in high speed and high temperature flows. Due to the expansion of microflow predictions in MEMS during the last twenty years, new fields of investigation have been opened. In these new flow fields, surface effects play a preponderant role in the calculation of flow properties and also in the description of heat and mass transfer phenomena. This concerns micro flows under conditions of moderate temperature, whose mean velocity is generally low compared with the speed of sound.

Solving these new problems requires first to investigate the processes of interaction between the gas and the solid surface, that is to investigate the physico-chemical properties of the particles that constitute the gas and the wall surface. Even if the chemical reactions due to gas particles colliding with the surface are disregarded (as they will be in the present work), gas/surface interactions remain a complicated subject, controversial with regard to basic points. The mechanical and thermodynamic aspect of the surface is obviously to be taken into account. In this respect, one can mention the surface orientation with regard to the atomic network of the solid body and the roughness of the solid surface, as well as its temperature. Investigation is not only required concerning the contact with the surface but also concerning the flow at the vicinity of the surface. This vicinity is generally considered as limited to some mean free paths from the surface and this area defines the kinetic boundary layer or Knudsen layer. The evolution of the flow properties is different in this Knudsen layer from what it is in the area far from the wall, and therefore has to be described differently. Indeed, because of the local Knudsen number, which is in the order of 1 in the Knudsen layer, the continuum equations of fluid mechanics are no longer valid, except the mass conservation equation. The Boltzmann equation, which describes the evolution of the particle distribution function, can of course be used. In this case we must however give special attention to the weight of each of the various terms involved in the Boltzmann equation : there is a hierarchy of these terms which is not the same as the one existing far from the wall.

In spite of a large number of publications concerning the Knudsen layer and the temperature jump and slip velocity at the wall, the issue of the establishment of a boundary condition related to gas/surface interaction is still open, and the results obtained so far are far from being satisfactory or completely consistent. The first chapter of this thesis, mainly devoted to a survey of the literature, is not to be considered as a list of earlier works. It is rather a global view on the usual approaches that can be found in the literature. The fundamental insufficiencies of these approaches are pointed out. As can be seen in this chapter, there are still wide divergences among authors concerning even the interpretation and definition of certain basic notions. For example the theoretical definition of the temperature jump, as well as the interpretation of the Knudsen layer, differs from one author to the other. These divergences on basic concepts show that the knowledge on boundary conditions related to gas/surface interaction is still fragmentary. Thus, in this first chapter, we also clarify the conceptual frame of the work presented in the document. Given the clear distinction that we make between the concept of Knudsen layer and the notions of physical discontinuities at the wall (temperature jump, slip velocity), the study of the

Knudsen layer is not fully developed in our work, whose main purpose is the modelling at the wall that is to say the modelling of kinetic boundary conditions.

The second chapter is devoted to the construction of a new scattering kernel governing the reflection at the wall of unstructured (or atom-like) molecules. In this chapter we recall and discuss the physical conditions required in the scattering kernel theory, especially the thermodynamic equilibrium condition usually called "reciprocity relation". Technically, the construction begins with the integral formulation of the scattering kernel problem - such a formulation was introduced by Cercignani. Then the physical conditions required in the scattering kernel theory are translated into the integral operator formalism. The most important part of the construction lies on the new treatment of this integral formulation, starting from the discussion on the special nature of the associated integral operator. This treatment differs from those leading to previous models and the present approach provides a kinetic boundary condition model which deviates from existing models. Here, the kinetic properties of the molecules interacting with the surfaces are directly involved in the spectral nature of the associated integral operator. The kinetic properties describing the microscopic states of the particles are the three components of the momentum in the case of unstructured molecules, supplemented by the various modes of internal energies (rotational energy, vibrational energy, etc) in the case of complex molecules. The third chapter is precisely devoted to the generalisation of the construction of the scattering kernel to the case of complex molecule gases.

*The work presented in chapter 2 and in chapter 3 can be read in English version in the two articles published in **Journal of Mathematical Physics** :*

- *S. K. Dadzie and J. G. Méolans, Anisotropic scattering kernel : Generalized and modified Maxwell boundary conditions, *Journal of Mathematical Physics*, 45, (5), 1804-1819 (2004)*
- *J. G. Méolans and S. K. Dadzie, Scattering kernel for polyatomic molecules, *Journal of Mathematical Physics*, 46, (6), (2005)*

Chapter 4 deals with the calculation of temperature jump and slip velocity at the wall. In this chapter we presented a methodology for temperature jump and slip velocity calculation. Practically, we used a direct calculation of the mean flow properties (heat flux and mean velocity) based on their respective kinetic definitions at the wall. To undertake an explicit calculation, we have used a complete (first order) Chapman-Enskog form for the incoming distribution function at the wall to derive first order slip and jump relations. Nevertheless, the proposed methodology can be used with another form of distribution function for the incoming particles : for example a distribution function modified through the Knudsen layer that would provide a correction on the slip and jump relations or a high order distribution function which can provide high order slip and jump conditions. Therefore, the validity of the slip and jump expressions obtained from our calculations are discussed in this chapter.

In order to take roughly into account the effects of the Knudsen layer on the slip and jump relations, one can bring some corrections to the results obtained from the use of the (first order) Chapman Enskog type of distribution function close to the wall. Such a correction is proposed for the temperature jump and is based on the evaluation of the significant variation of the gradients (compared to gradients in the flow out of this layer) which occur



in the Knudsen layer. Thus, the proposed correction is to take into account this variation by means of a coefficient  $k_e$  (see relation (4.30)). This coefficient  $k_e$ , represents the order of magnitude of the variation of the temperature gradient between the inlet of the Knudsen layer and the contact with the wall; such a coefficient could be measured experimentally, and may be evaluated numerically or theoretically. The corrected temperature jump expression is written in relation (4.31), in the same form as the corrected expression obtained by *Welanders*, who solved the Boltzmann equation in the Knudsen layer using BGK model [72].

*The first part of the work presented in chapter 4, which concerns only the monoatomic gases, can be read in an article published in **Physica** :*

- *S. K. Dadzie and J. G. Méolans, Temperature jump and slip velocity calculations from an anisotropic scattering kernel, physica A, 358, (2-4) 328-346 (2005)*

The second part of chapter 4 concerns the temperature jump calculation in polyatomic gases. The established relation is written in relation (4.57). In this case, the viscosity effects on the temperature jump become remarkable. Indeed, due to the presence of rotational mode, the effects of the bulk viscosity appear on the temperature jump relation and are supported by the relative variation of the density. From the continuity equation (relation (4.58)), taking into account important density gradients in the Knudsen layer compared to the density gradients existing far from the wall, (for example adopting relation (4.59), used in ordinary theory of thermal boundary layer [72]), one can see that the bulk viscosity effects on the temperature jump at the wall cannot be disregarded in polyatomic gases, especially in high speed flows and at low pressures.

Chapter 5 is devoted to implementations of the new kinetic boundary conditions and of the new slip relations in some particular rarefied gas flow problems. In the first part of this chapter, the theoretical expression of the slip length is discussed and our new expression seems to give more realistic results than the classical approach, when they are compared to experiments. We also analyze a problem recently encountered in Couette rarefied gas flow called "problem of inverted velocity profiles in cylindrical Couette rarefied gas flow". It is shown that the present modelling does not lead to the phenomena of "inverted" profiles, which seems to be related to the classical Maxwell modelling.

*These studies concerning slip length and "inverted profile phenomena" can be read in English version in the paper :*

- *Slip length and problem of anomalous velocity profiles, S. Kokou Dadzie and J. Gilbert Méolans AIAA , 4th Theoretical Fluids Mechanics Meeting, Toronto June 2005, in AIAA journal Proceeding*

The second part of chapter 5 concerns calculations of drag coefficients in high altitude hypersonic flows. The drag coefficient derived from the present modelling of the gas/surface interaction is written in relations (5.31) and (5.32). Then, this theoretical expression of the drag coefficient is compared to experimental values given by *Bellomo et. al.* [106]. The comparisons are presented in figures 5.6 and 5.7, and are satisfactory.

In the conclusion of this work some discussions on a rigorous way to tackle Knudsen layer

problem are developed, notably concerning assumptions like the local thermodynamic equilibrium which is a fundamental argument in most classical kinetic model such as BGK, Chapman development, or Grad moment method. Such a local equilibrium cannot be always assumed in the Knudsen layer or in the transition regime. Thus, other kinetic models which can take into account the effects of a small number of collisions in this layer are expected. Some models like the bimodal distribution method, used by Mott-Smith [47], can be investigated and adapted to this topic.

# Chapitre 1

## Généralités et état de l'art

Dans ce chapitre introductif principalement destiné à la bibliographie, on commencera par un rappel sur l'équation fondamentale de la théorie cinétique des gaz, à savoir l'équation de Boltzmann, et sur les diverses approches développées pour la résoudre. Ensuite on introduira le thème central de cette étude : le problème des conditions aux limites et de la modélisation de ce qui se passe aux voisinages d'une paroi. On présentera un exposé et une analyse critique de la façon dont ce problème est appréhendé dans la littérature en liaison avec les diverses méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann. Une partie de la bibliographie sera consacrée à un exposé détaillé sur la théorie du scattering kernel à travers la littérature. On mettra également en place les définitions et concepts de base qui permettent de formuler le sujet, ce qui conduira à remarquer que certaines notions font l'objet d'interprétations divergentes.

### 1.1 L'équation de Boltzmann et ses techniques d'approche

#### 1.1.1 L'équation de Boltzmann

Un des principaux objectifs de la théorie cinétique est la description de la distribution des particules d'un milieu gazeux considéré. Ici la distribution des particules est donnée par l'équation de Boltzmann qui décrit l'évolution spatio-temporelle de la fonction de distribution des particules. Si  $f \equiv f(t, X, \xi)$  désigne cette fonction de distribution, l'équation de Boltzmann s'écrit dans le cas d'un gaz simple :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial f}{\partial x} = I(f, f) \quad (1.1)$$

où  $I(f, f)$ , l'opérateur de collision, est un opérateur intégral qui décrit le bilan d'interaction des particules et dépend du potentiel d'interaction entre les particules. L'équation de Boltzmann est une équation intégro-différentielle dont les outils mathématiques actuels ne permettent pas une résolution complète. Le but des modèles cinétiques est donc de trouver une approche de cette équation permettant de décrire convenablement l'évolution du gaz ou du milieu considéré.

Compte tenu des hypothèses qui sous-tendent cette équation, les propriétés macroscopiques du milieu ne dépendent que de la fonction de distribution. On peut ainsi à partir de cette équation cinétique établir des équations généralisées de conservation en fonction des paramètres macroscopiques (température, vitesse, pression, densité) du milieu. Mais les équations de conservations restent incomplètes et la fermeture du système nécessite une recherche de la forme approchée de la fonction de distribution.

Pour que les descriptions cinétiques soient complètes, il faut encore leur adjoindre des conditions aux limites, surtout lorsqu'on considère des écoulements près d'une paroi. Il s'agit précisément d'adjoindre une description de l'interaction des particules avec la paroi ou tout simplement la distribution des particules dans le voisinage immédiat de la paroi.

Pour les molécules de structure complexe l'équation (1.1) se généralise en prenant en compte les différents niveaux d'énergie interne que peuvent occuper les molécules. La fonction de distribution dépend alors aussi du niveau d'énergie interne qu'elle caractérise. La description cinétique et l'écriture des conditions aux limites deviennent alors un peu plus compliquées comme on le verra dans les chapitres suivants.

### 1.1.2 Les méthodes d'approche de l'équation de Boltzmann

L'objectif des modèles cinétiques est de permettre d'approcher les solutions en contournant les difficultés que pose la manipulation de l'intégrale de collision. Dans ce domaine de recherche, on retiendra d'abord certains grands travaux autour desquels se construisent encore aujourd'hui les modèles cinétiques. Il s'agit des travaux associés à des noms illustres comme *Maxwell, Hilbert, Chapman, Enskog, Bhatnagar, Gross, Krook* etc.

Il faut noter que nous ne parlons ici que des modèles cinétiques basés sur une approximation de la solution de l'équation (1.1). Nous n'évoquons pas les méthodes numériques basées sur la discrétisation de l'espace des vitesses ni celles qui permettent d'éviter la résolution de l'équation (1.1) comme la méthode DSMC (Direct Simulation of Monte Carlo). Ces méthodes jouent aussi un rôle important dans l'obtention des résultats. Elles peuvent apporter une aide précieuse dans la recherche et la validation des modèles basés sur une approche de solution de l'équation (1.1). Mais, elles sortent du cadre fixé dans cette étude basée sur la formulation analytique de modèles à partir des équations fondamentales et éventuellement d'hypothèses physiques nouvelles.

#### Le modèle BGK (Bhatnagar-Gross-Krook)

Le modèle, sans doute le plus simple, et le plus répandu pour éluder la difficulté que pose l'opérateur de collision est le modèle généralement appelé BGK (du nom de ses initiateurs Bhatnagar-Gross-Krook). Il consiste à remplacer l'opérateur de collision dans son intégralité par une différence entre la fonction de distribution recherchée et une distribution d'équilibre local. On pose ainsi,

$$I(f, f) = \frac{1}{\tau_{bgk}}(F^0 - f) . \quad (1.2)$$

Derrière cette simple substitution de l'opérateur de collision se trouve une idée fondamentale qui consiste à décrire le processus de collision comme un phénomène de relaxation : dans ce modèle on considère que le rôle principal de l'opérateur de collision est de permettre la relaxation de la fonction de distribution vers une distribution d'équilibre ; on suppose de plus, que la fonction de distribution réelle n'est pas très éloignée de la distribution d'équilibre supposée. Le paramètre  $\tau_{bgk}$  est le temps caractéristique d'évolution de la distribution des particules vers la distribution d'équilibre.

Le déséquilibre dans la distribution des particules n'est que le résultat d'une perturbation imposée au sein du milieu (ici perturbation signifie l'existence de gradient d'une quantité macroscopique comme température, pression, vitesse.) Ainsi la différence  $(F^0 - f)$  représente la perturbation qui dépend surtout des gradients. L'argument suivant lequel  $f$  ne doit pas être trop éloignée de  $F^0$  est essentiel pour assurer la validité de ce modèle. En

d'autres termes, la différence  $(F^0 - f)$  doit être effectivement de l'ordre d'une "perturbation".

Ce modèle simple traduit la plupart des traits fondamentaux de l'opérateur collisionnel, mais il présente aussi de lourdes insuffisances que l'on peut pallier en partie au détriment de la simplicité originelle du modèle. On peut d'abord introduire un temps de relaxation (ou une fréquence de collision) dépendant de la vitesse des molécules pour parvenir à une description plus physique de l'interaction. On peut aussi apporter un autre type de correction rendant les équations macroscopiques qui dérivent de BGK plus compatibles avec les équations de Navier Stokes : ainsi on peut obtenir notamment un nombre de Prandtl réaliste, égal à  $\frac{2}{3}$  au lieu de la valeur 1 donnée par le modèle BGK initial. Pour cela, la Maxwellienne locale  $F^0$  qui figure dans la relation (1.2) est remplacée soit par une gaussienne locale anisotrope (modèle ES [1]), soit par une variante de la solution de Chapman-Enskog [18]. Toutefois ces modèles, sont demeurés longtemps entachés d'un doute portant sur leur compatibilité avec le théorème-H de l'équation de Boltzmann, et la deuxième approche a des allures de placage artificiel d'une fonction de Chapman-Enskog, choisie a priori, pour retrouver un flux de chaleur convenable. Récemment *Andries et. al* [69] ont montré la compatibilité du modèle ES avec le théorème- *H*.

Le modèle BGK a été aussi été étendu aux molécules polyatomiques, éventuellement hors d'équilibre interne. Ainsi, *Morse* [85] a proposé de généraliser l'expression (1.2) sous la forme

$$I(f, f) = \frac{1}{\tau_{el}}(F^{t,i} - f) + \frac{1}{\tau_{in}}(F^0 - f) , \quad (1.3)$$

où  $F^0$  est la distribution de Maxwell-Boltzmann à la température d'équilibre local  $T^0$ ,  $F^{t,i}$  est la distribution Maxwellienne à la température de translation  $T_t$  et Boltzmannienne suivant la température interne  $T_i$ . Les paramètres  $\tau_{el}$  et  $\tau_{in}$  sont respectivement les temps de relaxation élastique et inélastique. La relation (1.3) exprime que l'équilibre local est obtenu sous l'influence des collisions inélastiques (à l'échelle de temps  $\tau_{in}$ ), à partir d'une distribution  $F^{t,i}$  mise en forme par les collisions rapides (sur l'échelle de temps  $\tau_{el}$ ). On note que plusieurs modes internes pourraient être pris en compte dans ce type de modélisation [73].

## Les méthodes de perturbations

Les techniques de perturbations sont la base de nombreux modèles cinétiques. Elles constituent ainsi la caractéristique commune de beaucoup de ces modèles. Les principales différences entre ces méthodes se situent dans la façon dont s'effectue la décomposition en forme de petites perturbations et aussi dans le traitement du petit paramètre de la décomposition. L'utilisation de ces techniques dans la résolution de l'équation de Boltzmann est marquée essentiellement par trois noms : *Hilbert-Chapman-Enskog*. D'une façon générale la fonction de distribution est décomposée en une série de fonctions de la façon suivante

$$f = f_0 + \epsilon_0(K_n)f_1 + \epsilon_1(K_n)f_2 + \epsilon_3(K_n)f_3 + \dots \quad (1.4)$$

L'introduction de cette décomposition dans l'équation de Boltzmann permet une décomposition de l'opérateur intégral lui-même. On en déduit une série d'équations (souvent linéaires) que l'on résoud successivement. Les fonctions d'ordre  $\epsilon_m(K_n)$ , où  $m \in \mathbb{N}$ , sont fonction du seul nombre sans dimension de l'E.B., le nombre de Knudsen  $K_n$ .

Quelque soit la méthode de perturbation, la première solution  $f_0$  se rapporte toujours à une distribution d'équilibre local (ou à un état qui généralise cette notion) et les perturbations, une fois encore, sont attribuées aux effets des gradients macroscopiques. Une étape

essentielle dans la construction de ces modèles est le détail du calcul des coefficients de transport que l'on trouve par exemple dans la théorie de *Chapman-Enskog*.

Il faut noter que la méthode dite des échelles multiples est aussi une méthode de perturbation mais reste pour sa part très différente des méthodes asymptotiques usuelles que sont les méthodes de décomposition de type Chapman. Cette méthode des échelles multiples est idéale pour les descriptions où la physique fait déjà intervenir différentes échelles de temps simultanément, ce qui est le cas pour les échanges que subissent les molécules polyatomiques. D'ailleurs dans notre chapitre 4 nous utiliserons les modèles cinétiques polyatomiques de Morse basés sur cette méthode.

### L'équation de Boltzmann linéarisée (LBE) et les décompositions sur un ensemble de polynômes

A côté des méthodes de perturbations l'autre outil mathématique très utilisé dans l'approche de l'équation de Boltzmann est celui des bases Hilbertiennes et des décompositions polynomiales ou spectrales. Dans certains modèles de perturbation apparaît déjà l'utilisation des décompositions polynomiales dans le calcul des coefficients de transport comme chez Chapman qui utilise les Polynômes de Sonine-Laguerre. La version linéarisée de l'équation de Boltzmann s'obtient en remplaçant dans cette équation la distribution  $f$  initiale, par  $(F^0 + f_\phi)$  avec la condition  $\|f_\phi\| \ll \|F^0\|$ . On obtient ainsi une équation de la forme

$$\frac{\partial f_\phi}{\partial t} + \xi \cdot \frac{\partial f_\phi}{\partial x} = I_L(f_\phi) \quad (1.5)$$

L'opérateur  $I_L(f_\phi)$  possède globalement les mêmes propriétés que  $I(f, f)$  mais de plus il est linéaire, ce qui facilite sa manipulation. La linéarité de l'opérateur  $L(f_\phi)$  permet l'application des outils mathématiques des opérateurs linéaires, comme les décompositions polynomiales ou les décompositions spectrales. Ces techniques de décomposition sur une base Hilbertienne ou sur un ensemble de polynômes ont beaucoup contribué à l'extension des descriptions cinétiques aux cas des gaz diatomiques ou des gaz de molécules complexes. On peut citer sur ce dernier point l'utilisation des polynômes de Wang Chang-Uhlenbeck construits à partir de l'énergie interne des molécules.

Malheureusement les facilités qu'offre l'utilisation de la version linéarisée de l'EB, (les décompositions sur un ensemble de polynômes) ne peuvent être utilisées sans discernement dans la description cinétique des phénomènes de transport aux abords des parois. Ainsi répondant à la question de la validité de la version linéarisée de l'EB, Cercignani [6] écrit que la version linéarisée ne peut être utilisée aux abords des parois que sous les conditions suivantes :

$$\left| \frac{T_w - T_0}{T_0} \right| \ll 1 ; \quad \left| \frac{U_w - U_0}{RT_0} \right| \ll 1 \quad (1.6)$$

Les conditions (1.6) expriment en effet que les états auxquels renvoient la Maxwellienne définissant l'état d'équilibre thermodynamique local de la paroi et la Maxwellienne définissant l'état d'équilibre thermodynamique local du gaz, sont proches l'un de l'autre, de sorte que les deux états d'équilibre ne se détruisent pas. En d'autres termes la présence de la paroi ne perturbe pas trop l'équilibre thermodynamique local supposé du gaz.

On notera que les conditions (1.6) peuvent être généralisées pour des gaz de molécules complexes. Lorsque le gaz polyatomique est de plus en situation de fort déséquilibre du point de vue de l'énergie interne des particules (énergie de vibration par exemple) on est conduit à distinguer différentes températures ( $T$  et  $T_{vib}$  de vibration par exemple). Dans

une telle situation l'utilisation de la linéarisation près des parois, implique que la distribution de Maxwell-Boltzmann hors d'équilibre interne (où la répartition suivant les niveaux de vibration est Boltzmanienne en  $T_{vib}$ ) décrivant le gaz reste proche de la Maxwellienne décrivant l'état de la paroi. C'est à dire qu'aux conditions (1.6) il faudrait ajouter

$$\left| \frac{T_w - T_{vib}}{T_{vib}} \right| \ll 1 \quad (1.7)$$

En poussant l'analyse des conditions (1.6) un peu plus loin, on peut dire qu'elles traduisent une situation où les perturbations provenant de la paroi ne peuvent avoir plus d'effet (sur le déséquilibre du gaz) que les perturbations dont le siège est à l'intérieur de l'écoulement, loin de la paroi. Cette analyse est confirmée par les résultats qu'on obtient dans la couche de Knudsen lorsqu'on l'étudie à l'aide de ces méthodes : les corrections provenant de la couche de Knudsen obtenues par ces méthodes sont généralement faibles.

### 1.1.3 Remarque sur les modèles cinétiques

Que ce soit dans le modèle empirique BGK, dans les méthodes de perturbations, ou encore dans les méthodes de décomposition sur bases polynomiales, on retrouve toujours un rôle prépondérant joué par une distribution d'équilibre local qui rappelle, fondamentalement, la recherche d'une solution proche d'un état d'équilibre local, supposé, du gaz. Les parties complémentaires de la distribution dépendent quand à elles des gradients intérieurs à l'écoulement et décrivent ainsi les phénomènes de transport dus à ces perturbations. Même dans les méthodes dites méthodes des moments, basées sur les équations de transfert, et non directement sur l'équation de Boltzmann, comme chez Grad [96], on retrouve cette structure. Dans la méthode des moments de Grad, on utilise la notion de fonction poids, qui, dans le choix retenu par Grad, se confond avec la Maxwellienne d'équilibre local, et on a recours ensuite à une décomposition sur une base de polynômes d'Hermite.

Tous les modèles cinétiques décrits dans la section précédente, ont fait leur preuve dans la description de certaines gammes d'écoulements et certaines gammes de phénomènes de transport : plus précisément pour des écoulements à faibles gradients ou du moins caractérisés par une distribution de particules peu éloignée de la distribution d'équilibre local. Mais en ce qui concerne les abords des parois, qui peuvent être caractérisés par des gradients très importants, l'hypothèse d'une distribution peu éloignée de la Maxwellienne d'équilibre local n'est plus toujours satisfaite : a priori, ces modèles cinétiques ne sont donc pas toujours bien adaptés aux phénomènes qui apparaissent dans ces régions. Pourtant, en l'absence d'approche plus satisfaisante, ces modèles sont encore aujourd'hui les plus utilisés pour décrire les écoulements de gaz raréfiés dominés par les effets de paroi.

## 1.2 Conditions aux limites pour l'équation de Boltzmann

### 1.2.1 La question de l'interaction gaz/paroi

Les premières observations des effets de l'interaction des gaz avec une paroi solide sont dus à *Knuth et Warburg* [23] qui remarquèrent que les débits mesurés à travers des tubes pour de très basses pressions étaient sensiblement plus grands que ne le prévoyait le modèle de Poiseuille : il expliquèrent cet effet par un glissement du fluide à la paroi. Très rapidement la complexité du phénomène de l'interaction gaz/paroi a conduit les chercheurs à en faire un sujet important tout à fait parallèle à celui de la résolution de l'équation de Boltzmann elle-même.

Il existe plusieurs façons d'aborder le problème de l'interaction gaz/paroi. On en distingue ici essentiellement trois :

Le premier type d'approche relève d'une description purement phénoménologique. Il ne s'agit pas d'une description précise rigoureuse mais plutôt d'une traduction grossière du comportement des molécules gazeuses aux abords de la paroi solide. Ces descriptions sont généralement très simples et conduisent facilement à des conditions sur les paramètres macroscopiques du gaz. Certaines relations phénoménologiques sont d'ailleurs données directement sur les grandeurs macroscopiques (température, vitesse, contrainte, coefficient d'accommodations.) Sous cette forme, elles décrivent parfois les variations que subissent les paramètres macroscopiques du gaz au voisinage de la paroi et non pas le processus de réflexion sur la paroi solide.

Les conditions phénoménologiques ne fournissent guère des conditions limites à la fois rigoureuses et quelque peu réalistes pour l'équation de Boltzmann. Toutefois, il faut souligner que les plus utilisées d'entre elles sont bien établies sur la base de la théorie cinétique dans des situations idéales. C'est le cas, en effet, pour la condition dite "réflexion diffuse" ou "d'accommodation parfaite" qui consiste à poser que toutes les particules qui heurtent la paroi sont réfléchies dans un état cinétique correspondant à l'état thermodynamique de la paroi (i.e. qu'elles sont réfléchies suivant une distribution Maxwellienne à la température et à la vitesse de la paroi.) C'est sur ces bases de la théorie cinétique que Maxwell propose la première description du comportement des particules à la paroi, qui le conduit à la première expression de la vitesse de glissement [51]. Smoluchovski [65] suivra la même démarche pour proposer la première relation du saut de température à la paroi. Bien d'autres approches phénoménologiques ont été développées depuis. Nous reviendrons sur les conditions aux limites phénoménologiques les plus significatives dans le prochain paragraphe.

Le deuxième type d'approche, qui fait l'objet de la théorie de la théorie du scattering kernel, consiste à poser le problème de l'interaction gaz paroi en termes de conditions aux limites de l'équation de Boltzmann. Elle s'attache donc à la réflexion des particules sur la paroi solide en terme probabiliste. Cette théorie est encore en pleine construction. Elle permet de développer des procédures de construction systématique d'un opérateur de réflexion. Elle permet aussi de formuler rigoureusement des descriptions phénoménologiques connues et d'en faire apparaître clairement les insuffisances. Toutefois la construction d'opérateurs sur des bases purement mathématiques, sans recours à des considérations physiques précises, ne conduit pas forcément à des résultats concordant avec les observations expérimentales. Elle peut même parfois rendre difficile l'identification et l'interprétation des phénomènes dont on veut rendre compte. On reviendra longuement sur type d'approches puisque l'étude développée dans ce mémoire s'inscrit dans ce cadre théorique.

On peut aussi décrire les phénomènes à l'échelle microscopique, c'est-à-dire à l'échelle des rayons d'action des potentiels d'interaction. Ces descriptions demandent une connaissance fine de la constitution physico-chimique de la paroi et de l'interaction entre atomes du solide et les molécules du gaz. Les calculs deviennent alors très complexes et les résultats difficilement généralisables. On ne peut dire pour l'heure qu'il existe un modèle à la fois convaincant et facilement exploitable issu de ce type d'approche (généralement quantique).

L'objectif central de cette thèse sera donc la construction d'un opérateur de scattering kernel gouvernant la réflexion d'un gaz à la paroi, qui découle d'une formulation



mathématique rigoureuse, tout en s'appuyant sur des hypothèses physiques concrètes en rapport avec l'état microscopique des molécules. Pour ce faire nous partirons de deux descriptions du phénomène que l'on peut considérer comme essentielles, à savoir les descriptions phénoménologiques de Maxwell et les formulations mathématiques de Cercignani. On fera ensuite une première évaluation de la pertinence du nouveau modèle en comparant certains de ses résultats à quelques observations expérimentales.

## 1.2.2 Principaux modèles de conditions aux limites cinétiques

### Les modèles phénoménologiques :

#### a- Les modèles phénoménologiques Maxwelliens

La façon la plus simple de schématiser la paroi dans la procédure de résolution de l'équation de Boltzmann est de considérer que les particules réfléchies se comportent comme si elles provenaient d'un autre milieu constitué du même gaz en équilibre à température  $T_w$  et à vitesse  $U_w$  de la paroi. Cette description est celle de la réflexion dite totalement diffuse. Dans les calculs, cela se traduit par l'attribution d'une distribution Maxwellienne à la température de la paroi aux molécules réfléchies. Mais une telle représentation est trop schématique : les particules ne se réfléchissent pas d'une façon aussi idéale. Aussi Maxwell fut-il conduit à proposer pour le flux de particules réfléchies, dans un état cinétique donné, une combinaison linéaire d'un flux de particules réfléchies de façon diffuse et d'un flux de particules réfléchies de façon spéculaire (comme le serait un rayon lumineux sur un miroir). Nous reviendrons plus en détails sur le modèle de Maxwell dans le chapitre 2 où nous présenterons une nouvelle description phénoménologique en partant de la description de Maxwell. Ce modèle sera repris par des auteurs qui considèrent que le coefficient de cette combinaison dépend de la vitesse des particules [61].

#### b- La fonction de distribution réfléchie de Nocilla et le modèle HSN

Au début des années soixante, *Nocilla* [108] décrit les particules réfléchies à la paroi par une distribution Maxwellienne centrée autour d'une vitesse différente de celle de la paroi et caractérisée aussi par une température différente (le Shifted Maxwellian distribution function). Cette distribution qui dépend de trois paramètres ajustables fut complétée un peu plus tard par *Hulbuth et Sherman* [40] qui proposèrent une relation entre le flux monocinétique de particules de Nocilla et la fonction de distribution incidente. On aboutit ainsi à une description connue sous le nom de modèle Hulburt-Sherman-Nocilla (HSN) qui donne des résultats intéressants notamment dans le domaine de la dynamique moléculaire des faisceaux monocinétiques (molecular beam). On reviendra sur l'idée de Nocilla à différentes reprises dans ce mémoire.

### Les conditions aux limites cinétiques dans la théorie du scattering kernel :

Le flux monocinétique de particules réfléchies fût exprimé dès les années cinquante à l'aide d'un opérateur intégral appliqué à l'espace des fonctions de distribution incidentes : dans cette forme intégrale intervient déjà un "opérateur de probabilité" indépendant de la fonction incidente [14]. Mais c'est vers la fin des années soixante que fût formulée de façon rigoureuse le problème des conditions aux limites de l'équation de Boltzmann à travers un opérateur de probabilité et que fut introduite une condition thermodynamique dite relation de réciprocité notamment par *Kuscer et Cercignani* [6, 50, 94]. Cette formulation est connue depuis sous le nom de la théorie du scattering kernel .

#### a- Le modèle Cercignani-Lampis (modèle CL)

Le modèle Cercignani-Lampis [26] est le plus connu des modèles construits dans le cadre

de la théorie du scattering kernel. Il comporte deux paramètres ajustables qui s'identifient au coefficient d'accommodation de la partie normale de l'énergie cinétique (obtenue à partir de la composante normale de la vitesse des particules) et au coefficient d'accommodation de la composante tangentielle de la quantité de mouvement. La technique de la construction de ce modèle relève de la décomposition de l'opérateur de scattering kernel sur un ensemble de polynômes ; elle est rappelée au chapitre 2 où elle est comparée à notre deuxième technique de construction. Il faut noter que ce modèle d'interaction gaz/paroi est obtenu de diverses façons par différents auteurs : *Cercignani* [26, 27], *Cowling* [86] à partir d'hypothèses mathématiques, et *Kuscer* [98] à partir du principe des mouvements Browniens.

Le modèle CL s'est révélé plus satisfaisant que celui de Maxwell pour traduire la réflexion des faisceaux monocinétiques de particules : ainsi, il permet d'obtenir dans le plan de l'incidence, la forme de lobe caractérisant la trace du flux de particules réfléchies en coordonnées polaires [26]. Il donne toutefois, des résultats moins probants que l'expression de Nocilla, surtout pour les flux hautement énergétiques [40]. Par ailleurs les mesures de *Bellomo et al.* [106] concernant le coefficient de traînée et le flux de chaleur en régime moléculaire libre hypersonique ont fait apparaître quelques limites du modèle surtout au voisinage de l'incidence normale : pour les valeurs élevées du rapport  $\frac{T_w}{T_0}$  entre température de paroi et température du gaz, les valeurs expérimentales du coefficient de traînée sont moins élevées que les valeurs données par le modèle CL. D'autre part, soumis à la sévère contrainte de devoir restituer, à la fois le flux de chaleur et le coefficient de traînée, mesurés pour différentes valeurs de l'angle d'attaque, le modèle CL ne peut fournir des résultats partout satisfaisant pour le coefficient de traînée [19].

#### **b- Le modèle CLL et le modèle élasto-diffusif**

Pour tenter de pallier les insuffisances du modèle CL, Cercignani introduisit un modèle tendant à concilier la rigueur du formalisme mathématique du scattering kernel et les caractéristiques essentielles du modèle phénoménologique de Nocilla. Reprenant une idée déjà ancienne, il utilisa le fait qu'on peut engendrer, par une procédure simple, des opérateurs de scattering kernel à partir d'opérateurs de réflexion  $R_0(\xi, \xi')$ , de départ, qui ne satisfont pas forcément les conditions nécessaires d'un scattering kernel. Ici on part d'une fonction  $R_0(\xi, \xi')$  proche de la fonction Maxwellienne de Nocilla (shifted Maxwellian). Cette démarche aboutit à la construction d'un modèle, incluant trois paramètres ajustables dont la signification physique n'est pas très évidente, connu sous le nom du modèle CLL (Cercignani-Lampis-Lentatis)[30]. Ce modèle n'efface pas vraiment les défauts du modèle CL concernant la surestimation du coefficient de traînée pour les grandes valeurs de  $\frac{T_w}{T_0}$  ( $\geq 2$ ). Il faut remarquer qu'en 1999 fût proposé une variante plus simple du modèle. Cette dernière améliore légèrement les résultats concernant le coefficient de traînée mais donne de moins bons résultats pour les coefficients de chaleur [29].

Selon l'analyse même de leurs auteurs, les modèles CL et CLL sont, par construction, incapables de prédire des coefficients de traînée inférieurs à 4 lorsque le rapport  $\frac{T_w}{T_0}$  augmente [28]. Cette constatation entraîne un regain d'intérêt pour le kernel élastodiffusif déjà signalé par Kuscer et qui s'écrit.

$$\frac{V_x \delta(V - V')}{\pi V^3}$$

Il s'agit là d'un cas d'école dont l'intérêt est surtout mathématique et démonstratif. Ce kernel, qui annule le flux réfléchi du moment tangentiel, donne pour les écoulements à grande vitesse, des coefficients de traînée inférieurs à 4 quelque soit l'angle d'attaque et le rapport  $\frac{T_w}{T_0}$ . Un nouveau modèle intégrant ces caractéristiques a été construit en suivant la procédure de construction du modèle CLL [28]. L'opérateur  $R_0(\xi, \xi')$  est choisi ici proche

du kernel élastodiffusif sous la forme d'une suite de fonctions exponentielles dépendant d'un paramètre qui permet d'ajuster la perte d'énergie et l'on retrouve le dirac originel quand ce paramètre ajustable tend vers l'infini. On aboutit ainsi à un scattering kernel qui, comme on pouvait le prévoir, donne de bons résultats pour le coefficient de traînée en écoulement libre hypersonique. Mais le modèle conduit à des résultats moins corrects que le modèle CLL quand  $\frac{T_w}{T_0}$  devient petit comme pour les satellites artificiels terrestres. De plus l'expression nouvelle ne rend pas très bien compte du flux de chaleur.

### Diverses extensions de la théorie du scattering kernel

Les opérateurs de réflexion précédemment décrits concernent des molécules sans structure interne et leurs procédures de construction font apparaître des coefficients ajustables indépendants des éléments moléculaires microscopiques (vitesse, énergie, etc.) Enfin la paroi est considérée strictement imperméable et non réactive. Quelques tentatives ont été faites pour s'affranchir de ces restrictions et étendre le champ d'application de la théorie du scattering kernel dans différentes directions.

#### a- En direction des molécules polyatomiques

*Kuscer* aborda la généralisation du formalisme de la théorie du scattering dans divers travaux parus dans les années soixante-dix [97, 93, 98]. Il proposa en premier lieu, sur la base de principe physique, une formulation de la relation de réciprocité en polyatomique. En 1978, il proposa un modèle de scattering kernel pour les polyatomiques ; le kernel se présente comme un produit du CL modèle pour le mode de translation et d'un opérateur analogue au CL modèle pour le mode interne.

*Lord* a présenté un modèle destiné à réduire l'accommodation de l'énergie du modèle CL et prendre en compte l'influence du mode vibrationnel sur la réflexion de molécules diatomiques [74, 75]. L'auteur scinde l'opérateur CL en deux opérateurs partiels : l'un relatif à la vitesse tangentielle et l'autre contenant l'énergie cinétique normale. Puis il propose un opérateur partiel pour le mode vibrationnel sur la base d'une analogie avec l'opérateur CL partiel dévolu à l'énergie.

#### b- En direction des coefficients dépendant de la vitesse moléculaire

*Muller* [111] a proposé une combinaison linéaire d'opérateurs du modèle CL dont les coefficients sont posés, a priori, dépendants de la vitesse moléculaire. En imposant à cette combinaison les conditions requises pour un scattering kernel, l'auteur obtient une expression incluant sept paramètres quasiment arbitraires. Le modèle est présenté par l'auteur comme flexible et bien adapté à la simulation des expériences de dynamique moléculaire. Toutefois le caractère prédictif du modèle ne paraît nullement établi.

#### c- En directions des surfaces réactives

On sort ici de la théorie du scattering kernel au sens strict. Une des conditions retenues dans cette théorie qui est celle de la normalisation de l'opérateur de probabilité, n'est plus valable. Néanmoins, certains auteurs ont présenté des formes de kernels généralisés de façon purement phénoménologique par l'introduction d'un terme de perte pour prendre en compte le caractère réactif de l'interaction à la paroi (adsorption, dissociation etc.) [77].

## 1.3 Le problème de la couche de Knudsen

Dans un écoulement de gaz près d'une paroi, la couche de Knudsen est définie comme la zone de l'écoulement au contact de la paroi sur une épaisseur de l'ordre du libre parcours moyen. Dans cette zone, on estime que les phénomènes de transport (surtout le transport de chaleur) sont différents de ceux qui prévalent loin de la paroi. En réalité, la question

de la couche de Knudsen fait partie d'un domaine plus vaste de la théorie cinétique des gaz, aujourd'hui encore mal connu : celui de la description des phénomènes de transport en régime de transition ( $0.1 < K_n < 20$ ). Dans ce domaine, nous pouvons citer, après les premiers travaux de *Knuth et. al* [23] et de *Gregory* [?], la vague des travaux parus dans les années soixante et centrés sur le transport de chaleur, à savoir les travaux de *Gross et Ziering* [38], *Wang Chang et Uhlenbeck* [9], et de *Lees* [58]. Un peu plus tard *Teagan et Springer* [88] comparèrent leurs résultats expérimentaux aux résultats donnés par les expressions théoriques de *Gross et Ziering*, *Wang Chang et Uhlenbeck*, et par celles de *Lees*. Ils constatèrent des discordances significatives entre les mesures et les prédictions théoriques. Seules les descriptions théoriques de *Lees* semblaient correspondre aux données expérimentales.

On peut tirer divers enseignements de ces travaux qui sont orientés vers la recherche de l'expression de flux de chaleur en régime de transition et vers le calcul de ce flux à la paroi. On sait en effet que la théorie cinétique prédit une conductivité thermique  $\lambda_c$  indépendante de la pression lorsque le nombre de Knudsen  $K_n$  est petit devant 1 ainsi qu'une expression  $\lambda_c$  proportionnelle à la pression pour les  $K_n$  très élevés. Mais pour des valeurs intermédiaires ( $1 \leq K_n \leq 20$ ), qui caractérisent aussi bien le régime de transition que la couche de Knudsen, l'expression de  $\lambda_c$  est mal connue. A fortiori l'expression du flux de chaleur demeure mal définie dans les conditions mêmes où elle serait particulièrement utile (notamment en recherche spatiale). Or, sur ce point l'analyse des travaux énumérés précédemment permet de conclure que ni la variation de la conductivité avec la température et la pression, ni les valeurs prises par les gradients thermiques, ne peuvent rendre compte des transferts thermiques observés, dès lors qu'on se réfère à une expression classique du flux de chaleur de type Navier Stokes. On peut d'ailleurs noter que ce problème avait déjà été souligné en 1924 par *Mandell et West* [110].

D'autre part, le problème plus particulier de la couche de Knudsen avait été formulé et attaqué bien plus tôt, essentiellement sous l'angle de l'évaluation des discontinuités pariétales et plus particulièrement celle du saut de température à la paroi. En effet avant que ne soit posée la question du transfert de chaleur en régime de transition, *Knuth* observa que la température du gaz en contact avec la paroi solide n'était pas toujours la même que celle de la paroi. Puis au début de 20<sup>e</sup> siècle *Smoluchowski* et *Knudsen* furent conduits au même constat. L'étude de la couche fût alors centrée principalement autour d'un calcul aussi correct que possible du saut de température à la paroi [72, 64] puis sur celui des vitesses de glissement [64, 7].

A quelques exceptions près, les articles plus récents qui traitent de la couche de Knudsen négligent quelque peu la physique du phénomène de transport dans la couche. Ces travaux se focalisent plutôt sur un calcul de saut de vitesse ou de saut de température à la paroi en partant de méthodes de résolution de l'équation de Boltzmann issues des techniques citées au paragraphe 1.1.2 de ce chapitre. La question d'une expression du flux de chaleur à l'intérieur de la couche de Knudsen est donc laissée en suspend. De plus, dans ces travaux la question de la modélisation réaliste de la loi de réflexion à la paroi est éludée et l'on choisit des conditions aux limites cinétiques ad hoc pour faciliter les calculs. Ces travaux s'apparentent donc beaucoup plus à une résolution de l'équation de Boltzmann à l'ordre supérieur (ordre supérieur au sens des méthodes de perturbations décrites au début de ce chapitre) en présence d'une paroi très schématisée, qu'à une description du phénomène de transport dont la couche de Knudsen est le siège sous l'effet de l'interaction gaz/paroi. A ces différences concernant le point de vue sous lequel on aborde la question de la couche de Knudsen, viennent s'ajouter des divergences concernant la définition des discontinuités pariétales que l'on calcule (saut de température et vitesse de glissement notamment.)

### 1.3.1 Saut de température chez Welander, $\Delta T = T'_{Kn} - T_w$

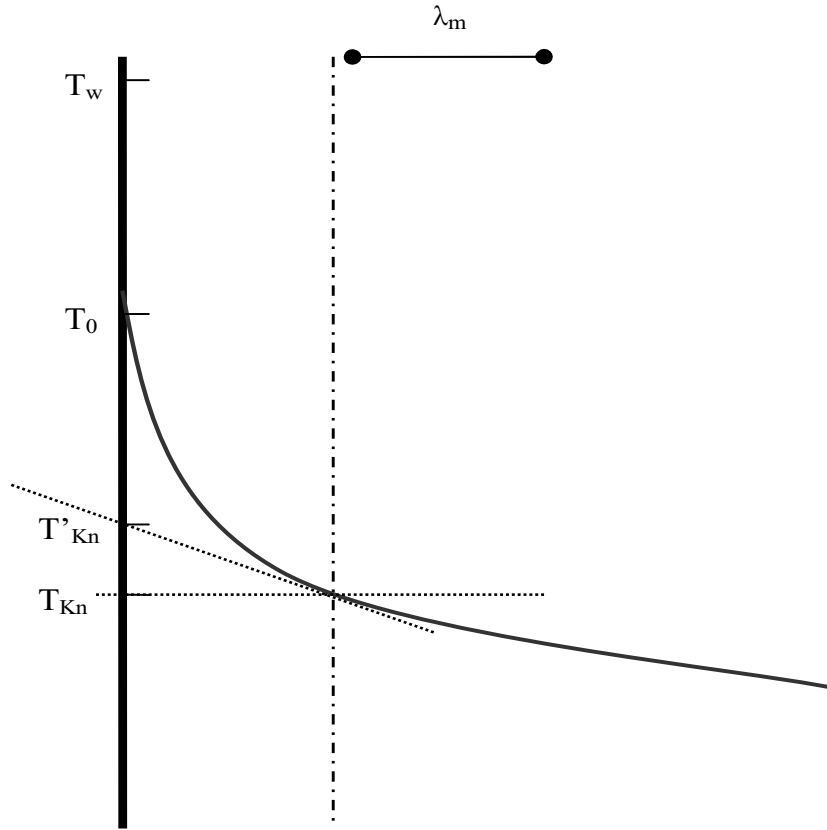


Fig. 1.1: Profil de température près d'une paroi sur une zone de quelques libres parcours moyens

Considérons la représentation schématique du profil de température dans un gaz près d'une paroi (figure 1.1). En plus de la température  $T_w$  de la paroi elle-même, plusieurs valeurs de température sont définies dans le voisinage de la surface solide :  $T_{Kn}$  est la température du gaz, prise à l'entrée de la couche de Knudsen ;  $T'_{Kn}$  est celle obtenue au contact de la paroi par extrapolation du gradient d'entrée de la couche de Knudsen ;  $T_0$  est quant à elle la température réelle du gaz au contact de la paroi. Notons néanmoins que les deux températures qui ont un sens pratique sont  $T_w$  et  $T_0$ .

Dans son traitement de la question du saut de température, Welander définit le saut de température à la paroi par la relation

$$\Delta T = T'_{Kn} - T_w \quad (1.8)$$

Cette façon de définir le saut de température permet d'introduire, à l'échelle du libre parcours moyen, un calcul de variation du gradient de la température à travers la couche de Knudsen. Ainsi le travail de *Welander* est basé sur l'évaluation de la différence ( $T'_{Kn} - T_0$ ) pour laquelle il utilisa le modèle BGK en imposant comme conditions aux limites une distribution Maxwellienne à la température de la paroi, pour les particules réfléchies. Pour avoir l'expression complète de saut de température suivant sa définition (1.8), la partie ( $T_0 - T_w$ ) est simplement représentée par l'expression phénoménologique qu'en donne *Smoluchowski* à l'aide d'un coefficient d'accommodation de l'énergie.

La conception de *Welander* de la couche de Knudsen est caractérisée par deux hypothèses essentielles :

1. Dans la couche de Knudsen les variations des gradients sont très importantes et du même ordre que les gradients eux-mêmes.
2. Compte tenu de la faible épaisseur de la couche de Knudsen (quelques libres parcours moyens) les variations relatives des grandeurs macroscopiques (notamment des températures) restent faibles devant 1 et devant la variation relative de leur gradient.

Compte tenu de ces propriétés, la variation des paramètres macroscopiques dans la couche peut être négligée dans l'équation cinétique et dans le processus de résolution de cette équation. Le calcul de *Welander* permet d'éliminer le gradient local au bénéfice du gradient existant à l'entrée de la couche cinétique, c'est à dire en limite du continuum. Mais il reste que *Welander* recourt explicitement à l'hypothèse d'un gradient thermique local adimensionné petit devant 1 ainsi qu'à celle d'une discontinuité pariétale du même ordre que ce gradient. A ce titre la méthode s'inscrit dans le cadre restreint tracé par la relation (1.6). Néanmoins cette modélisation de la couche de Knudsen a souvent été reprise et elle a été notamment étendue aux gaz polyatomiques hors d'équilibre interne [2, 55]

### 1.3.2 Saut de température chez Gupta et al., $\Delta T = T_{Kn} - T_w$

Chez certains auteurs comme Gupta [78], les relations de saut à la paroi sont tout simplement considérées comme des variations de quantités macroscopiques (température, vitesse, densité, pression) à travers la couche de Knudsen définie près de la paroi. Soit pour la température :

$$\Delta T = T_{Kn} - T_w . \quad (1.9)$$

Cette définition montre qu'ici, la question de la couche de Knudsen se ramène au calcul d'une certaine variation des paramètres macroscopiques du gaz à travers une couche de transition. On remarque dans cette autre conception que le  $T_0$  n'est pas correctement identifiée et semble être prise égale à  $T_w$ . Cette façon de traduire les effets de la couche de Knudsen va quelque peu à l'encontre de la conception de *Welander* dans laquelle on voit nettement la distinction entre  $T_0$  (température du gaz au contact de la paroi) et  $T_w$ , et où la couche Knudsen est vue comme une variation importante des gradients sans influence sensible sur les valeurs des paramètres macroscopiques dans la couche.

### 1.3.3 Autres conceptions des notions de discontinuités pariétales

Chez d'autres auteurs (e.g. chez *Cercignani*)[80], la question du saut de température est traitée d'emblée comme un problème de conditions aux limites définissant le saut de température par la relation

$$\Delta T = T_0 - T_w . \quad (1.10)$$

Enfin, pour sa part, traitant du problème de saut de température, *Kogan* [64] propose la décomposition suivante pour la solution de l'équation de Boltzmann :

$$f = f_{NS} + f_\mu = F^0(1 + \phi_{NS} + \phi_{KL}) \quad (1.11)$$

où  $f_{NS} = F^0(1 + \phi_{NS})$ , est la partie de la solution conduisant aux équations macroscopiques de Navier Stokes et  $f_\mu = F^0\phi_{KL}$ , est une autre perturbation attribuée à la couche de Knudsen. Dans l'analyse de *Kogan*, l'existence d'un saut à la paroi est perçue comme due à la présence de la couche de Knudsen dont il tient compte à travers le terme de perturbation complémentaire  $\phi_{KL}$ . Mais dans les détails du traitement du problème, *Kogan* ne traite

pas véritablement la question de l'interaction gaz/paroi ; en revanche il choisit d'en rendre compte schématiquement en considérant une paroi parfaitement diffusive. Finalement, la décomposition (1.11) s'apparente aussi aux méthodes de perturbations rappelées en début du chapitre ; elle se heurte aussi aux mêmes limites, et ne constitue donc pas forcément la description la plus adéquate d'un phénomène dû à la présence de la paroi.

Les diverses interprétations énumérées ci-dessus sur le saut de température concernent également la vitesse de glissement. Mais, ce qui devient plus marquant lorsqu'on considère les problèmes de profils de vitesses en microfluidique, ce sont les interprétations des discontinuités en terme de quantités fictives à la paroi [34]. En effet, compte tenu des déviations des profils de vitesses théoriques par rapport aux profils de vitesses expérimentaux, dues à l'emploi de conditions aux limites inadéquates, certains auteurs proposent d'utiliser à la place des quantités réelles à la paroi (qui restent d'ailleurs mal connues), des quantités macroscopiques fictives comme conditions aux limites pour les équations de Navier Stokes [104, 6]. En clair, on choisit une vitesse, différente de la vitesse réelle du gaz au contact de la paroi, comme vitesse à la paroi qui permet d'obtenir le bon profil de l'écoulement extérieur lorsque l'on utilise des équations de Navier Stokes dans tout le champ de l'écoulement. Cette vitesse fictive est souvent, schématisée par la vitesse obtenue par extrapolation du gradient à l'entrée de la couche de Knudsen vers la paroi. Les relations de discontinuités qu'on définit ainsi, sont aussi parfois appelées "correction de la couche de Knudsen" aux équations de Navier Stokes.

Dans la description de la couche de Knudsen donnée par *Gupta*, on voit pointer l'idée que la couche de Knudsen est le siège exclusif des discontinuités qui apparaissent aux limites : la température du gaz au contact de la surface ( $T_0$ ) n'est plus distinguée de  $T_w$  la température de la paroi elle-même. Cette idée se retrouve sous différentes formes dans la littérature. On en trouve une formulation particulièrement claire dans une étude de *Coron*. "La raison du phénomène de slip peut être expliqué aisément : le développement de Chapman-Enskog ne satisfait pas aux conditions aux limites et ne sont par conséquent pas valable dans le voisinage du corps solide, appelé couche de Knudsen..." Une telle formulation prise au pied de la lettre, semble indiquer que c'est l'application d'un système inadéquate (ici le système de Navier Stokes) qui crée les discontinuités pariétales. Autrement dit, si l'on établissait le bon système d'équation de transfert, ou si l'on trouvait une solution suffisamment correcte de l'équation de Boltzmann, il n'y aurait plus de discontinuité pariétale et donc plus de vitesse de glissement. Une telle assertion nous paraît hasardeuse.

## 1.4 Définition du saut de température et de la vitesse de glissement adoptée dans cette étude

Compte tenue des différentes définitions et des différentes interprétations existant sur la couche de Knudsen et plus précisément sur le saut de température et la vitesse de glissement à la paroi, il est nécessaire de préciser les définitions sur lesquelles s'alignent les calculs et commentaires présentés dans cette thèse. D'autre part, il faut noter aussi que compte tenu de ces divergences sur les notions de base il est souvent assez difficile de comparer directement les résultats des calculs effectués dans la présente approche avec certains résultats existants dans la littérature. C'est pourquoi on insistera sur les compa-

raisons que l'on peut faire au niveau des différentes démarches utilisées pour aborder le problème.

Si les équations de Navier-stokes ont aujourd'hui fait leurs preuves en tant que descriptions physiques et mathématiques pour le régime collisionnel, il n'en est pas de même pour les conditions de non-glissement du fluide à la paroi ni pour la condition de continuité de la température à l'interface fluide/solide, qui sont deux conditions généralement utilisées en mécanique des fluides ordinaires. Si  $U_0$  et  $T_0$  sont la vitesse et la température de gaz au contact de la paroi, on ne peut à priori affirmer que  $T_0 = T_w$  et  $U_0 = U_w$ . C'est pourquoi on peut poser littéralement les deux définitions suivantes :

**saut de température à la paroi**

$$\Delta T = T_0 - T_w = \lim_{x \rightarrow 0} T(x) - T_w \quad (1.12)$$

**vitesse de glissement du fluide sur la paroi**

$$\Delta U = U_0 - U_w = \lim_{x \rightarrow 0} U(x) - U_w \quad (1.13)$$

La question de l'évaluation de ces quantités ainsi définies se pose donc dans tout régime d'écoulement où les quantités macroscopiques  $T(X)$  et  $U(X)$  sont définissables. L'évaluation de ces deux expressions nécessite non seulement la connaissance de la distribution des particules de l'écoulement loin de la paroi mais de façon impérative la connaissance de l'interaction avec la paroi.

\*\* On pourra remarquer qu'en réalité, la vitesse de glissement définie par la relation (1.13), lorsqu'elle est calculée avec une fonction de distribution incidente de type Navier Stokes, coïncide avec ce que l'on appelle dans la référence [6] " la vitesse de glissement macroscopique" (c'est à dire la vitesse du gaz par rapport à la paroi, qu'on obtient par prolongement des gradients extérieurs à la couche de Knudsen, vers la paroi, et que l'on doit utiliser avec les équations de Navier Stokes). Évidemment lorsque ce calcul est effectué à l'aide de la fonction de distribution supposée "exacte" dans la couche de Knudsen, la relation (1.13) donne par définition la vitesse appelée "vitesse microscopique" de glissement (c'est à dire tout simplement la vraie vitesse du gaz au contact de la paroi).

## 1.5 Conclusion

La description d'un écoulement de gaz dont le régime est dominé par l'interaction des particules avec la paroi ne relève pas seulement de la technique d'approximation que l'on utilise pour résoudre l'équation de Boltzmann. Elle dépend profondément de la modélisation de l'interaction des particules avec la paroi. On peut regretter qu'à ce jour les recherches dans ce domaine semblent majoritairement orientées vers la recherche de solution "d'ordre élevé" de l'équation de Boltzmann, associée à des conditions aux limites assez simplistes, choisies parfois dans le seul but de simplifier le traitement des équations, au détriment du rôle capital joué par la paroi dans les phénomènes décrits.

Dans ce mémoire, les chapitres 2 et 3 qui suivent sont exclusivement consacrés à l'interaction des particules du gaz avec la paroi. Ensuite les relations (1.12) et (1.13) permettront de distinguer clairement la recherche des relations de discontinuités pariétales de la recherche des phénomènes de transport dans la couche de Knudsen. Les relations de discontinuités peuvent s'établir a priori aussi bien dans le cadre de la couche de Knudsen, associées à un écoulement extérieur de type Navier Stokes que dans le cadre plus



général d'un régime de transition où elles seraient alors associées à une autre description des phénomènes de transport dans tout le champ de l'écoulement.

## Chapitre 2

# Conditions aux limites cinétiques : construction d'un scattering kernel

Dans ce chapitre on construit un modèle d'opérateur de réflexion des particules à la paroi pour un gaz de molécules sans structure interne. Dans une première étape, on commence par donner une description phénoménologique inspirée de la première description de Maxwell, en prenant en compte les critiques qui ont été formulées depuis à l'égard de ce premier modèle. En modulant les arguments de la description de Maxwell suivant les différents degrés de liberté des molécules, on aboutit à une première présentation du nouvel opérateur. Dans la deuxième partie, on donne une formulation mathématique du problème de scattering kernel qui permet d'établir le modèle par une démarche plus systématique.

### 2.1 La théorie du scattering kernel

Considérons la collision d'une particule de gaz sur une surface solide, schématisée sur la figure ci-dessous. La particule est représentée ici par sa vitesse mesurée dans un repère lié à la paroi. Au lieu d'analyser finement l'interaction de chaque particule de gaz avec une

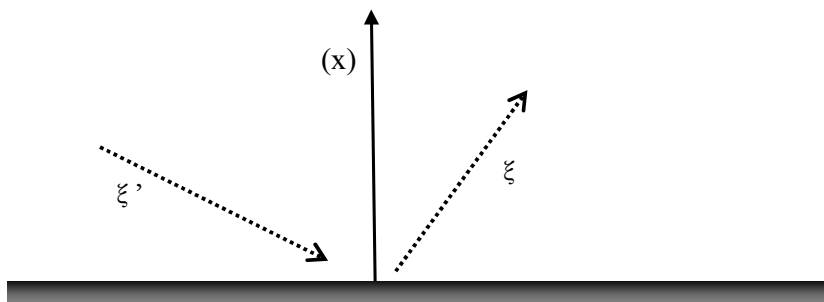


Fig. 2.1: particule réfléchissant sur une paroi

particule de la paroi, on peut décrire les phénomènes en termes de probabilité dans le cadre d'une approche statistique. On introduit pour cela l'opérateur de probabilité  $\mathcal{B}(X, \xi', \xi)$ , qui représente la probabilité pour qu'une particule incidente de vitesse voisine de la vitesse  $\xi'$ , ait après réflexion au point  $X$ , une vitesse voisine de la vitesse  $\xi$ . Cette description est fondée sur des hypothèses analogues à celles qui sous-tendent l'équation de Boltzmann qui, elle aussi régit des densités de probabilité représentées par les fonctions de distribution des particules. Ces hypothèses permettent de considérer l'impact de la particule sur la paroi

comme instantané, et l'opérateur  $\mathcal{B}(X, \xi', \xi)$  indépendant de la distribution des particules incidentes.

### 2.1.1 Conditions requises pour tout scattering kernel

#### La positivité et la normalisation

De par son statut de fonction densité de probabilité, l'opérateur  $\mathcal{B}(X, \xi', \xi)$  doit évidemment être positif et normalisé. Cela suppose aussi qu'aucune particule n'est perdue à la paroi :

$$\mathcal{B}(\xi', \xi) \geq 0 , \quad (2.1)$$

et

$$\int_{\Omega} \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi = 1 . \quad (2.2)$$

En faisant le bilan du flux de particules, en un temps  $t$  donné, sous l'hypothèse qu'aucune particule n'est perdue lors de la réflexion (imperméabilité de la paroi), on peut écrire :[5]

$$\xi_x f(\xi) = \int_{\Omega'} |\xi'_x| f(\xi') \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi' . \quad (2.3)$$

Dans cette dernière expression, on peut choisir de noter la fonction  $f(\xi)$  du premier membre par  $f^+(\xi)$  pour désigner une fonction de distribution réfléchie et, sous le signe somme,  $f(\xi')$  par  $f^-(\xi)$  pour désigner une fonction de distribution incidente.

#### La relation de réciprocité

La relation de réciprocité est la condition thermodynamique introduite dans le domaine de la réflexion à la paroi. En supposant que la paroi est un corps localement en équilibre thermodynamique, le bilan microscopique d'échange local entre la paroi et le gaz conduit à [97] :

$$|\xi'_x| F_w(\xi') \mathcal{B}(\xi', \xi) = |\xi_x| F_w(-\xi) \mathcal{B}(-\xi, -\xi') \quad (2.4)$$

La relation (2.4) est la traduction de l'hypothèse de réversibilité en situation d'équilibre thermodynamique à l'échelle microscopique : à tout instant, le nombre de particule dont la vitesse change de  $\xi'$  en  $\xi$  lors de leur collision avec la paroi, est égal au nombre de particules dont les vitesses passent de  $-\xi$  à  $-\xi'$ .

#### La relation de préservation de l'état d'équilibre

Sans introduire l'hypothèse supplémentaire d'équilibre thermodynamique local de la paroi, on peut démontrer, indépendamment de la relation de réciprocité, une autre relation thermodynamique qui est celle de la préservation de l'état d'équilibre thermodynamique. On procède de la façon suivante : étant donnée que la densité de probabilité  $\mathcal{B}(X, \xi', \xi)$  est indépendante de la distribution des particules incidentes, il s'en suit que l'opérateur  $\mathcal{B}(X, \xi', \xi)$  est valable pour toute distribution physiquement envisageable pour les particules incidentes et plus particulièrement dans le cas où tout le système gaz/paroi serait maintenu en équilibre thermodynamique avec la même vitesse macroscopique et à la même température. Hors, dans cette dernière situation, la distribution des particules aussi bien incidentes que réfléchies, est donnée par une Maxwellienne à la température et

à la vitesse de la paroi. Il s'en suit donc que la Maxwellienne à la température de la paroi est invariante par  $\mathcal{B}(X, \xi', \xi)$ ; soit

$$\xi_x F_w(\xi) = \int_{\Omega'} |\xi'_x| F_w(\xi') \mathcal{B}(\xi', \xi) d_{\xi'} . \quad (2.5)$$

En fait, la non dépendance de l'opérateur  $B(X, \xi', \xi)$ , de la distribution des particules incidentes est un argument purement stochastique qui découle des hypothèses sur les collisions à la paroi (plus précisément de l'hypothèse des collisions binaires suivant laquelle lors de la collision avec la paroi, la particule n'interagit pas avec une autre particule (Réf.[5] page 229)). Par conséquent, la relation (2.5) a certes une signification thermodynamique, mais elle ne requiert aucunement, comme c'est le cas pour la relation de réciprocity, une hypothèse supplémentaire concernant l'équilibre thermodynamique local de la paroi.

Par ailleurs, la condition (2.5) est souvent présentée dans la littérature comme découlant de la relation de réciprocity. En effet, la relation (2.5) s'obtient facilement à partir de la relation de réciprocity, par simple intégration de la relation (2.4) en utilisant astucieusement la condition de normalisation. Néanmoins, elle est moins restrictive que la relation de réciprocity (2.4), ce qui peut lui conférer un grand intérêt. Dans l'état actuel des connaissances, la relation de préservation de l'état d'équilibre suffit pour démontrer un Théorème-H de l'équation de Boltzmann à la paroi [52][27] et l'utilisation de cette relation suffira aussi pour la construction du nouvel opérateur de scattering kernel qui sera présenté dans ce chapitre.

La relation de réciprocity (2.4) et la relation de préservation de l'état d'équilibre (2.5) sont physiquement et mathématiquement différentes, même si elle tendent parfois à se confondre. La première suppose que la paroi est en équilibre local alors que la deuxième n'est soumise à aucune contrainte mises à part les hypothèses stochastiques. Néanmoins, un bon opérateur Kernel doit vérifier la relation de réciprocity en situation d'équilibre local de la paroi. En revanche, ceci n'est plus une obligation dans le cas où la paroi n'est plus en équilibre thermodynamique local; et dans ce dernier cas on peut néanmoins toujours écrire une relation de préservation d'état d'équilibre entre gaz et paroi. En d'autres termes, du point de vue de la thermodynamique, une bonne loi de réflexion à la paroi doit d'une part, préserver l'état d'équilibre thermodynamique entre gaz et paroi; et d'autre part, en situation d'équilibre de la paroi, vérifier la relation de réciprocity.

## 2.2 Descriptions phénoménologiques

### 2.2.1 Le modèle de Maxwell

Abordant la question des conditions aux limites de l'équation de Boltzmann, Maxwell considère d'abord une surface parfaitement lisse et "élastique," parfaitement réfléchissante au sens d'un miroir. Lors de la collision d'une particule gaz avec une telle surface, il n'y a, selon Maxwell, aucune altération des composantes de la quantité de mouvement de la particule et il n'y a pas non plus d'échange énergétique entre le gaz et la paroi, à ceci près que la composante normale de la vitesse de la particule est inversée lors de la collision. Il considère ensuite une surface se comportant comme une sorte de puits, d'intérieur rugueux, dans lequel toute particule gaz arrivant à la surface entre et effectue plusieurs collisions avec les particules constituant la paroi avant d'être rejetée vers le gaz. Lorsque

la particule ressort de ce "puits", elle se trouve dans un état cinétique correspondant à l'état thermodynamique de la paroi. Tout se passe comme si la particule venait d'un gaz de même nature qu'elle, mais en équilibre thermodynamique à la température et à la vitesse de la paroi.

En terme de scattering kernel les deux opérateurs, correspondant respectivement à ces deux types de surfaces, sont :

– l'opérateur de réflexion spéculaire :

$$\mathcal{B}_{spe}(\xi', \xi) = \delta(\xi - \xi'_R) = \delta(\xi_x + \xi'_x)\delta(\xi_y - \xi'_y)\delta(\xi_z - \xi'_z) \quad (2.6)$$

– et l'opérateur de réflexion diffuse

$$\mathcal{B}_{dif}(\xi', \xi) = \frac{2}{C_w^4 \pi} \xi_x e^{-\frac{\xi^2}{C_w^2}} . \quad (2.7)$$

Admettant qu'une surface réelle doit se comporter comme une entité située entre ces deux types de surfaces idéales, Maxwell suppose alors qu'une partie des particules se comporte comme face à une surface spéculaire et l'autre partie comme face à une surface diffuse. Le scattering kernel correspondant à cette description de Maxwell s'écrit donc :

$$\mathcal{B}_{Max}(\xi', \xi) = (1 - \alpha)\delta(\xi - \xi'_R) + \alpha \frac{2}{C_w^4 \pi} \xi_x e^{-\frac{\xi^2}{C_w^2}} \quad (2.8)$$

Même si la description de Maxwell est facile à interpréter et semble a priori assez réaliste, l'opérateur de réflexion finalement proposé demeure critiquable sous un certain nombre d'aspects. En effet, même si on admet qu'une surface réelle fonctionne selon un mécanisme qui la situe entre les deux surfaces extrêmes, le fait de prendre une combinaison linéaire des deux opérateurs représentant ces deux surfaces limites pour restituer le comportement d'une surface intermédiaire semble trop brutal. Cette combinaison simpliste traduit une liaison rigide des propriétés cinétiques qui deviennent ainsi soudées dans le processus de collision. Ainsi, lorsqu'on définit les coefficients d'accommodation de ces différentes propriétés (les trois composantes de la quantité de mouvement et l'énergie), ces coefficients d'accommodation apparaissent identiques dans le cadre du modèle. Autrement dit, la composante normale de la quantité de mouvement se comporterait de la même façon que les composantes tangentielles, de la même façon que l'énergie. Ce caractère de l'opérateur de Maxwell, souvent mal connu, est à l'origine de certains de ses échecs à représenter correctement les conditions aux limites dans certaines situations.

Néanmoins l'opérateur de Maxwell conserve un grand avantage sur d'autres opérateurs de réflexion : il permet une description simple des processus physiques de l'interaction dont certains modèles purement mathématiques perdent la mémoire. De plus, il est facile à utiliser.

### 2.2.2 La modification d'Epstein

Une première modification du modèle de Maxwell fût tenté par *Epstein en 1967* [61]. Ce dernier, partant de l'idée que la fonction de distribution réfléchie devrait dépendre de la vitesse incidente de la particule, propose de remplacer l'expression (2.8) par

$$\mathcal{B}_{Eps}(\xi', \xi) = (1 - p(\xi'))\delta(\xi - \xi'_R) + p(\xi')F(\xi) . \quad (2.9)$$

où  $p(\xi')$  est une fonction de probabilité arbitraire qui remplace le coefficient  $\alpha$  et  $F(\xi)$  est une fonction de densité de distribution qui remplace l'opérateur diffusif (2.7). En imposant

à l'opérateur,  $\mathcal{B}_{Eps}$  de satisfaire les relations de réciprocité et la condition de normalisation, on arrive à la relation suivante entre la fonction de distribution incidente et la fonction de distribution réfléchie donnée par l'opérateur d'Epstein :

$$f^+ - f^- = p(\xi)(F_w - f^-) .$$

Or, la fonction de distribution réfléchie donnée par l'opérateur de départ de Maxwell donne déjà une relation similaire :

$$f^+ - f^- = \alpha(F_w - f^-) .$$

En conclusion, le modèle d'Epstein n'est autre que le modèle Maxwellien dans lequel le coefficient  $\alpha$  devient une densité de probabilité fonction de la vitesse. Cette nouvelle fonction  $p(\xi)$  est construite de façon arbitraire.

Ce modèle ne présente donc pas une grande différence formelle avec l'opérateur de Maxwell lui-même, étant donné que le  $\alpha$  de Maxwell est déjà un paramètre arbitraire caractéristique du couple gaz/paroi compris entre  $[0, 1]$ . Toutefois  $p(\xi)$  dépend ici de la vitesse.

### 2.2.3 Nouvelle description phénoménologique

Reprenons à la base la discussion de Maxwell sur les conditions aux limites. Mais cette fois-ci au lieu de considérer une combinaison des deux opérateurs représentant des surfaces parfaites pour représenter la surface réelle, analysons plus en détail le processus de collision lui-même et supposons que les composantes soient libres de jouer entre elles. Chaque composante de la quantité de mouvement peut être altérée ou non par la paroi, a priori indépendamment des autres lors de la collision. Ceci introduit une certaine modulation du processus d'interaction suivant les composantes. Ainsi, dans le processus d'interaction, chaque composante de la quantité de mouvement peut évoluer de façon autonome (ou différenciée) de la réflexion spéculaire à la réflexion diffuse.

La nécessité de disconnecter les trois composantes de la quantité de mouvement dans le processus d'interaction affleure dans diverses simulations et expériences sur l'interaction des particules avec une paroi solide, sans être jamais formulée concrètement sur le plan théorique. Ainsi, par exemple, sur les résultats de simulation numérique présentés par Matsui [103], on voit des particules réfléchies se répartir en divers groupes qui suivent une distribution gaussienne suivant les différentes composantes de la vitesse. D'autre part, on peut distinguer expérimentalement l'accommodation de la composante normale de la quantité de mouvement, de l'accommodation de ses composantes tangentielles.

Cette nouvelle vision nous conduit à écrire une série d'opérateurs élémentaires, dans lesquels les composantes de la quantité de mouvement des molécules évoluent indépendamment sur le mode diffusif ou sur le mode spéculaire,

$$\mathcal{B}_0(\xi', \xi) = \delta(\xi_x + \xi'_x)\delta(\xi_y - \xi'_y)\delta(\xi_z - \xi'_z) , \quad (2.10a)$$

$$\mathcal{B}_{yz}(\xi', \xi) = \frac{1}{\pi C_w^2} \delta(\xi_x + \xi'_x) e^{-\frac{\xi_y^2}{C_w^2}} e^{-\frac{\xi_z^2}{C_w^2}} ,$$

$$\mathcal{B}_{xz}(\xi', \xi) = \frac{2}{C_w^3 \sqrt{\pi}} \xi_x \delta(\xi_y - \xi'_y) e^{-\frac{\xi_x^2}{C_w^2}} e^{-\frac{\xi_z^2}{C_w^2}} ,$$

$$\mathcal{B}_{xy}(\xi', \xi) = \frac{2}{C_w^3 \sqrt{\pi}} \xi_x \delta(\xi_z - \xi'_z) e^{-\frac{\xi_x^2}{C_w^2}} e^{-\frac{\xi_y^2}{C_w^2}} ,$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{xyz}(\xi', \xi) &= \frac{2}{\pi C_w^4} \xi_x e^{-\frac{\xi_x^2}{C_w^2}} e^{-\frac{\xi_y^2}{C_w^2}} e^{-\frac{\xi_z^2}{C_w^2}} , \\
\mathcal{B}_z(\xi', \xi) &= \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(\xi_x + \xi'_x) \delta(\xi_y - \xi'_y) e^{-\frac{\xi_z^2}{C_w^2}} , \\
\mathcal{B}_y(\xi', \xi) &= \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(\xi_x + \xi'_x) \delta(\xi_z - \xi'_z) e^{-\frac{\xi_y^2}{C_w^2}} , \\
\mathcal{B}_x(\xi', \xi) &= \frac{2}{C_w^2} \xi_x \delta(\xi_y - \xi'_y) \delta(\xi_z - \xi'_z) e^{-\frac{\xi_x^2}{C_w^2}} . \tag{2.10b}
\end{aligned}$$

Dans l'écriture de ces opérateurs élémentaires, le coefficient figurant devant chaque opérateur est un coefficient de normalisation obtenu par calcul de  $\int_{\Omega} \mathcal{B}_{\kappa}(\xi', \xi) d\xi$ . Les conditions de normalisation et de positivité sont donc évidemment satisfaites par ces opérateurs.

- Vérifions la relation de réciprocité : Prenons par exemple  $\mathcal{B}_z$ .

D'une part on a

$$|\xi'_x | F_w(\xi') \mathcal{B}_z(\xi', \xi) = |\xi'_x | \frac{n}{(C_w \sqrt{\pi})^3} e^{-\frac{(\xi_x'^2 + \xi_y'^2 + \xi_z'^2)}{C_w^2}} \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(\xi_x + \xi'_x) \delta(\xi_y - \xi'_y) e^{-\frac{\xi_z^2}{C_w^2}} ,$$

soit encore

$$|\xi'_x | F_w(\xi') \mathcal{B}_z(\xi', \xi) = |\xi'_x | \frac{n}{(C_w \sqrt{\pi})^3} e^{-\frac{(\xi_x'^2 + \xi_y'^2)}{C_w^2}} \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(\xi_x + \xi'_x) \delta(\xi_y - \xi'_y) e^{-\frac{\xi_z^2}{C_w^2}} e^{-\frac{\xi_z'^2}{C_w^2}} .$$

D'autre part on a

$$|\xi_x | F_w(-\xi) \mathcal{B}_z(-\xi, -\xi') = |\xi_x | \frac{n}{(C_w \sqrt{\pi})^3} e^{-\frac{(\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)}{C_w^2}} \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(\xi'_x + \xi_x) \delta(\xi'_y - \xi_y) e^{-\frac{\xi_z'^2}{C_w^2}} ,$$

soit encore

$$|\xi_x | F_w(-\xi) \mathcal{B}_z(-\xi, -\xi') = |\xi_x | \frac{n}{(C_w \sqrt{\pi})^3} e^{-\frac{(\xi_x^2 + \xi_y^2)}{C_w^2}} \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(\xi'_x + \xi_x) \delta(\xi'_y - \xi_y) e^{-\frac{\xi_z'^2}{C_w^2}} e^{-\frac{\xi_z^2}{C_w^2}} .$$

Dans ces dernières équations, on voit que dans les expressions de  $|\xi'_x | F_w(\xi') \mathcal{B}_z(\xi', \xi)$  et de  $|\xi_x | F_w(-\xi) \mathcal{B}_z(-\xi, -\xi')$ , figurent les mêmes termes en  $z$ . L'égalité complète des deux expressions vient des propriétés du dirac. Finalement nous avons

$$|\xi'_x | F_w(\xi') \mathcal{B}_z(\xi', \xi) = |\xi_x | F_w(-\xi) \mathcal{B}_z(-\xi, -\xi') . \tag{2.11}$$

L'opérateur  $\mathcal{B}_z$  satisfait donc la relation de réciprocité. Procédant de la même façon, on montre que tous les opérateurs élémentaires (2.10) satisfont la relation de réciprocité.

Chacun des huit opérateurs élémentaires (2.10) décrit en réalité une situation particulière d'accommodation possible à la paroi associant réflexion spéculaire ou diffuse de chaque composante de la vitesse. On peut donc construire un opérateur global en formant une combinaison linéaire de ces opérateurs partiels dans laquelle les coefficients représentent l'importance de chaque type d'accommodation à la paroi. Un tel opérateur de réflexion s'écrira

$$\mathcal{B}(\xi', \xi) = \sum_{\kappa} \mu_{\kappa} \mathcal{B}_{\kappa}(\xi', \xi) , \tag{2.12}$$

où les coefficients de combinaisons doivent satisfaire

$$\sum_{\kappa} \mu_{\kappa} = 1 . \quad (2.13)$$

Par ailleurs, puisque l'état cinétique d'une particule simple est défini par les trois composantes de sa quantité de mouvement et que le problème d'interaction d'une particule simple avec la paroi n'a que trois degrés de liberté, on suppose que les coefficients  $\mu_{\kappa}$  ne dépendent que de trois coefficients élémentaires  $\alpha_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ). Alors la condition de normalisation et de positivité imposent  $\alpha_j \in [0, 1]$ , et on obtient les expressions suivantes des  $\mu_{\kappa}$

$$\begin{aligned} \mu_{xz} &= \alpha_x \alpha_z (1 - \alpha_y) , & \mu_{xy} &= \alpha_x \alpha_y (1 - \alpha_z) , & \mu_{yz} &= \alpha_y \alpha_z (1 - \alpha_x) , \\ \mu_x &= \alpha_x (1 - \alpha_y)(1 - \alpha_z) , & \mu_{xyz} &= \alpha_x \alpha_y \alpha_z , & \mu_0 &= (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y)(1 - \alpha_z) , \\ \mu_y &= \alpha_y (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_z) , & \mu_z &= \alpha_z (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y) . \end{aligned} \quad (2.14)$$

L'opérateur ainsi défini par les relations (2.10), (2.12), et (2.14), satisfait les trois conditions requises pour un opérateur de scattering kernel. On remarque que le scattering kernel donné par la description de Maxwell n'est que la combinaison de deux des huit opérateurs élémentaires qui composent l'opérateur généralisé ainsi construit. De plus, en conformité avec l'existence de trois degrés de liberté pour une particule simple en mouvement, cet opérateur inclut trois paramètres dépendant du gaz et de la paroi et non plus un seul comme le modèle de Maxwell. Dans l'opérateur ainsi généralisé, apparaissent plusieurs types d'accommodation mixtes, possibles à la paroi, que l'opérateur de Maxwell ne prenait pas en compte.

## 2.3 Construction systématique de l'opérateur de réflexion

Dans la section précédente nous avons modifié la description des conditions aux limites faite par Maxwell pour aboutir à un opérateur généralisé qui fait intervenir plusieurs nouveaux types d'accommodation. Dans cette section, faisant totalement abstraction de ces descriptions purement phénoménologiques, nous reprenons le problème dans un autre formalisme, celui de la théorie des opérateurs et des décompositions spectrales.

### 2.3.1 Formulation intégrale

On se pose le problème de la recherche systématique d'un opérateur  $\mathcal{B}(\xi', \xi)$  satisfaisant aux conditions de normalisation, de positivité et de réciprocité, énumérées dans la première section de ce chapitre, et intégrant de plus le maximum d'informations physiques sur la réflexion à la paroi.

Pour cela on définit d'abord la transformation suivante

$$\mathcal{K}(\xi, \xi') = [|\xi'_x | F_w(\xi')|]^{\frac{1}{2}} [|\xi_x | F_w(\xi)|]^{-\frac{1}{2}} \mathcal{B}(\xi'_R, \xi) . \quad (2.15)$$

La relation (2.15) étant un simple changement de fonction, le problème de la détermination de  $\mathcal{K}(\xi, \xi')$  est équivalent à celui de la détermination de  $\mathcal{B}(\xi, \xi')$ . Considérons l'opérateur intégral associé à  $\mathcal{K}(\xi, \xi')$ , défini sur l'espace de Hilbert des fonctions de carré sommable  $\psi(\xi) : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$  noté  $L^2(\Omega)$ , par la relation

$$\mathcal{A}(\psi) = \int_{\Omega'} \mathcal{K}(\xi, \xi') \psi(\xi') d\xi' . \quad (2.16)$$



L'espace  $L^2(\Omega)$  est muni d'un produit scalaire défini par

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \int_{\Omega} \psi(\xi) \varphi(\xi) d\xi .$$

La formulation donnée par les relations (2.16), associée aux trois conditions de positivité, normalisation et réciprocity, est une formulation intégrale du problème de scattering kernel. On peut donc traiter le problème en étudiant la nature de l'opérateur intégral  $\mathcal{A}$ ; dans ce formalisme, le procédé consiste à décrire l'opérateur  $\mathcal{A}$ , ce qui revient à décrire son noyau  $\mathcal{K}$ .

Dans la suite nous allons admettre que l'opérateur  $\mathcal{A}$  admet une décomposition spectrale de sorte que l'on puisse écrire son noyau sous la forme

$$\mathcal{K}(\xi, \xi') = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \psi^n(\xi) \psi^n(\xi') , \quad (2.17)$$

où les  $\psi^n(\xi)$  sont les fonctions propres de  $\mathcal{A}$  et  $\lambda^n$  les valeurs propres associées,  $n \in \mathbb{N}$ . Si une telle représentation de l'opérateur  $\mathcal{K}$  existe, alors les fonctions propres  $\psi^n(\xi)$  de l'opérateur doivent correspondre à des situations bien précises dans la description du phénomène; en clair, les fonctions propres doivent se rapporter à des fonctions de distribution réfléchies décrivant des conditions bien définies. Si l'on voulait poursuivre la construction de l'opérateur  $\mathcal{K}$  en opérant des choix précis pour les fonctions propres de  $\mathcal{A}$ , il conviendrait que chacune des fonctions propres corresponde à la description d'une situation physique particulière, par exemple à un processus précis d'accommodation. Dans le cas contraire, un choix arbitraire des fonctions propres tendrait à imposer des contraintes artificielles à l'opérateur et limiterait ainsi sa validité.

### 2.3.2 Une démarche spectrale basée sur les degrés de liberté

Les trois conditions sur  $\mathcal{B}$  se traduisent par quelques propriétés immédiates sur l'opérateur intégral  $\mathcal{A}$ , (lire par exemple les Réfs. [6, 5, 26]); mais on retiendra surtout que ces propriétés ne suffisent pas pour déterminer entièrement l'expression de  $\mathcal{K}$ . Une des propriétés dérivée est que les valeurs propres doivent satisfaire  $\lambda^n \in [0, 1]$  pour tout  $n \in \mathbb{N}$ . Pour parvenir à une expression complète de  $\mathcal{K}$ , il nous faut des arguments complémentaires. Les lignes suivantes contiennent les points clefs de la démarche adoptée pour déterminer complètement l'opérateur.

On suppose que les fonctions propres,  $\psi^n(\xi)$  sont de la forme

$$\psi_r(\xi_x) \psi_l(\xi_y) \psi_m(\xi_z) = \prod_{j=1}^3 \psi_{k_j}(\xi_j) .$$

C'est à dire que les fonctions propres appartiennent à l'espace produit des trois espaces de Hilbert élémentaires  $L^2(\Omega_j)$ ,  $j = x, y, z$ , où  $\Omega_j$  est l'espace scalaire associé à la composante  $\xi_j$ . Si tel est le cas, alors la famille de fonction  $\psi_{k_j}(\xi_j)$ ,  $k_j \in \mathbb{N}$  est aussi une base de fonctions de l'espace de Hilbert élémentaire  $L^2(\Omega_j)$  et les valeurs propres de  $\mathcal{A}$  peuvent s'écrire  $\lambda_{rlm} = \lambda_r \lambda_l \lambda_m$ , grâce à la définition du produit scalaire sur  $L^2(\Omega)$  et à la définition des produits scalaires respectifs sur les espaces élémentaires  $L^2(\Omega_j)$ . L'expression (2.17) peut donc être remplacée par :

$$\mathcal{K}(\xi, \xi') = \sum_{r,l,m} \lambda_r \lambda_l \lambda_m \psi_r(\xi_x) \psi_l(\xi_y) \psi_m(\xi_z) \psi_r(\xi'_x) \psi_l(\xi'_y) \psi_m(\xi'_z) . \quad (2.18)$$

La somme dans le membre de droite de l'équation (2.18) est identique au produit de trois sommes infinies,

$$\mathcal{K}(\xi, \xi') = \prod_{j=1}^3 \sum_{k=0}^{\infty} \lambda_{k_j} \psi_{k_j}(\xi_j) \psi_{k_j}(\xi'_j) ; \quad (2.19)$$

dans cette écriture de la relation (2.19), l'indice  $j = 1, 2, 3$  est en fait l'indice  $j = x, y, z$ , qui désigne les composantes.

Posons

$$\begin{aligned} \psi_{0_x}(\xi_x) &= \frac{\sqrt{2}}{C_w} |\xi_x|^{1/2} e^{-\frac{\xi_x^2}{2C_w^2}} , \\ \psi_{0_y}(\xi_y) &= (C_w \sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-\frac{\xi_y^2}{2C_w^2}} , \\ \psi_{0_z}(\xi_z) &= (C_w \sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-\frac{\xi_z^2}{2C_w^2}} . \end{aligned}$$

Chacune des fonction  $\psi_{0_j}(\xi_j)$  satisfait

$$\| \psi_{0_j}(\xi_j) \|_j^2 = \int_{\Omega_j} [\psi_{0_j}(\xi_j)]^2 d\xi_j = 1 ,$$

ce qui signifie qu'elles sont normalisées dans leurs espaces partiels restreints respectifs.

A partir de la relation de réciprocité (2.5), on peut démontrer que la fonction  $\psi^0(\xi) = \psi_{0_x}(\xi_x) \psi_{0_y}(\xi_y) \psi_{0_z}(\xi_z)$  est une fonction propre de  $A$ , associée la valeur propre  $\lambda_{0_x} \lambda_{0_y} \lambda_{0_z} = 1$

**Preuve :** Remarquons d'abord que la condition de normalisation peut s'écrire aussi sous la forme

$$\int_{\Omega'} \mathcal{B}(-\xi, -\xi'_R) d\xi' = 1 .$$

En intégrant la relation de réciprocité (2.4), par rapport à  $\xi'$ , après avoir pris soin de substituer  $\xi'$  par  $\xi'_R$ , et en tenant compte de cette nouvelle formulation de la normalisation, on aboutit à cette autre expression dérivée de la relation de réciprocité

$$\int_{\Omega'} |\xi'_x| F_w(\xi'_R) \mathcal{B}(\xi'_R, \xi) d\xi' = |\xi_x| F_w(-\xi) .$$

Calculons alors

$$A(\psi^0) = \int_{\Omega'} [|\xi'_x| F_w(\xi'_R)]^{1/2} [|\xi_x| F_w(\xi)]^{-1/2} \mathcal{B}(\xi'_R, \xi) \psi^0(\xi') d\xi' . \quad (2.20)$$

Explicitant  $\psi^0(\xi')$  et  $F_w(\xi)$ , il vient

$$A(\psi^0) = \frac{\sqrt{2}}{C_w^2 \sqrt{\pi}} \int_{\Omega'} |\xi_x|^{-1/2} |\xi'_x| e^{\frac{\xi_x^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi'^2}{C_w^2}} \mathcal{B}(\xi'_R, \xi) d\xi' .$$

la relation dérivée de la réciprocité sous la forme (2.20) conduit donc au résultat

$$A(\psi^0) = \frac{\sqrt{2}}{C_w^2 \sqrt{\pi}} |\xi_x|^{1/2} e^{-\frac{\xi_x^2}{2C_w^2}} = \psi^0 . \quad (2.21)$$

Cette première fonction propre joue un rôle primordial. Elle est la fonction propre correspondant à la valeur propre maximale de l'opérateur  $A$  et par conséquent elle est susceptible

de renvoyer à une situation typique qui n'est ici que la situation d'équilibre. Dans une situation d'équilibre parfait, entre le gaz et la paroi, l'expression de l'opérateur de scattering kernel la plus évidente pour représenter la réflexion des particules est l'opérateur de réflexion diffuse, qui se retrouve contenu dans l'expression de cette première fonction propre. Ceci est en conformité avec l'idée qui fonde la relation de préservation de l'état d'équilibre, suivant laquelle l'opérateur de scattering kernel doit convenir aussi en situation d'équilibre thermodynamique entre le gaz et la paroi.

Par ailleurs, il est important de rappeler qu'en présence d'une paroi, c'est la relation de réciprocité ou la relation de préservation de l'état qui permet d'établir un théorème-H pour l'équation de Boltzmann [26, 5]. Autrement dit, contrairement à ce qui se passe loin d'une paroi, où c'est une Maxwellienne à la température du gaz seul qui pilote l'état d'équilibre le plus probable vers lequel doit tendre le milieu perturbé, près de la paroi, l'état d'équilibre le plus probable concerne l'ensemble gaz/paroi (et donc fait appel finalement à une Maxwellienne correspondant à l'état de la paroi) : ceci met encore un peu plus en évidence le rôle important de cette relation de réciprocité dans la théorie du scattering kernel.

On suppose maintenant que la dégénérescence de l'opérateur  $\mathcal{A}$  et le nombre de ses valeurs propres distinctes sont liés au nombre de degrés de liberté du problème. Étant donné que la première valeur propre est égale à 1 et compte tenu de la positivité et de la normalisation toutes les valeurs propres doivent être comprises entre 0 et 1, on introduit donc trois coefficients  $\alpha_j \in ]0, 1[$  caractérisant chacun de ces degrés de liberté. Ensuite, comme les espaces  $L^2(\Omega_j)$  sont en fait des espaces de phases, on peut donc relier les coefficients  $\alpha_j$  au jeu de valeurs propres de la façon suivante :  $\lambda_{0_j} = 1$ , et  $\lambda_{k_j} = (1 - \alpha_j)$  pour tout  $k$  différent de 0, quel que soit  $j$ . La relation (2.19) devient alors

$$\mathcal{K}(\xi, \xi') = \prod_{j=1}^3 (\psi_{0_j}(\xi_j) \psi_{0_j}(\xi'_j) + (1 - \alpha_j) \sum_{k=1}^{\infty} \psi_{k_j}(\xi_j) \psi_{k_j}(\xi'_j)) \quad (2.22)$$

que nous pouvons encore écrire sous la forme,

$$\mathcal{K}(\xi, \xi') = \prod_{j=1}^3 (\alpha_j \psi_{0_j}(\xi_j) \psi_{0_j}(\xi'_j) + (1 - \alpha_j) \sum_{k=0}^{\infty} \psi_{k_j}(\xi_j) \psi_{k_j}(\xi'_j)) .$$

D'autre part, étant donné que la famille de fonction  $\psi_{k_j}(\xi_j)$ ,  $k_j \in \mathbb{N}$  est une base de fonctions de l'espace de Hilbert élémentaire  $L^2(\Omega_j)$ , on a alors la propriété suivante

$$\sum_{k=0}^{\infty} \psi_{k_j}(\xi_j) \psi_{k_j}(\xi'_j) = \delta(\xi_j - \xi'_j) , \quad (2.23)$$

En utilisant cette propriété (2.23) on aboutit au résultat suivant

$$\mathcal{K}(\xi, \xi') = \prod_{j=1}^3 (\alpha_j \psi_{0_j}(\xi_j) \psi_{0_j}(\xi'_j) + (1 - \alpha_j) \delta(\xi_j - \xi'_j)) . \quad (2.24)$$

Développant le produit des trois facteurs figurant dans le résultat (2.24), on obtient  $\mathcal{K}$  sous la forme

$$\mathcal{K}(\xi, \xi') = \sum_{\kappa} \mu_{\kappa} \mathcal{K}_{\kappa}(\xi, \xi') , \quad (2.25)$$

où les opérateurs élémentaires  $\mathcal{K}_\kappa(\xi, \xi')$  s'écrivent

$$\mathcal{K}_0(\xi, \xi') = \delta(\xi_x - \xi'_x)\delta(\xi_y - \xi'_y)\delta(\xi_z - \xi'_z), \quad (2.26a)$$

$$\mathcal{K}_{yz}(\xi, \xi') = \frac{1}{\pi C_w^2} \delta(\xi_x - \xi'_x) e^{-\frac{\xi_y^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_z^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_y'^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_z'^2}{2C_w^2}},$$

$$\mathcal{K}_{xz}(\xi, \xi') = \frac{2}{C_w^3 \sqrt{\pi}} |\xi_x \xi'_x|^{\frac{1}{2}} \delta(\xi_y - \xi'_y) e^{-\frac{\xi_x^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_z^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_x'^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_z'^2}{2C_w^2}},$$

$$\mathcal{K}_{xy}(\xi, \xi') = \frac{2}{C_w^3 \sqrt{\pi}} |\xi_x \xi'_x|^{\frac{1}{2}} \delta(\xi_z - \xi'_z) e^{-\frac{\xi_x^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_y^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_x'^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_y'^2}{2C_w^2}},$$

$$\mathcal{K}_{xyz}(\xi, \xi') = \frac{2}{\pi C_w^4} |\xi_x \xi'_x|^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{\xi_x^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_y^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_z^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_x'^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_y'^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_z'^2}{2C_w^2}}, \quad (2.26b)$$

$$\mathcal{K}_z(\xi, \xi') = \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(\xi_x - \xi'_x)\delta(\xi_y - \xi'_y) e^{-\frac{\xi_z^2}{C_w^2}} e^{-\frac{\xi_z'^2}{C_w^2}},$$

$$\mathcal{K}_y(\xi, \xi') = \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(\xi_x - \xi'_x)\delta(\xi_z - \xi'_z) e^{-\frac{\xi_y^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_y'^2}{2C_w^2}},$$

$$\mathcal{K}_x(\xi, \xi') = \frac{2}{C_w^2} |\xi_x \xi'_x|^{\frac{1}{2}} \delta(\xi_y - \xi'_y)\delta(\xi_z - \xi'_z) e^{-\frac{\xi_x^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi_x'^2}{2C_w^2}}.$$

et où les  $\mu_\kappa$  s'expriment de la même façon que dans les relations (2.14), c'est à dire

$$\begin{aligned} \mu_{xz} &= \alpha_x \alpha_z (1 - \alpha_y), & \mu_{xy} &= \alpha_x \alpha_y (1 - \alpha_z), & \mu_{yz} &= \alpha_y \alpha_z (1 - \alpha_x), \\ \mu_x &= \alpha_x (1 - \alpha_y)(1 - \alpha_z), & \mu_{xyz} &= \alpha_x \alpha_y \alpha_z, & \mu_0 &= (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y)(1 - \alpha_z), \\ & & \mu_y &= \alpha_y (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_z), & \mu_z &= \alpha_z (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y). \end{aligned}$$

En exprimant les transformées des opérateurs de réflexion élémentaires dont on a fait la liste dans les relations (2.10), par la transformation (2.15), on trouve bien les opérateurs élémentaires de la relation (2.26). Par exemple, si on prend  $\mathcal{B}_y$  figurant dans (2.10), d'après la relation (2.17) on a

$$[|\xi'_x| F_w(\xi')]^{\frac{1}{2}} [|\xi_x| F_w(\xi)]^{-\frac{1}{2}} \mathcal{B}_y(\xi'_R, \xi)$$

qui s'écrit

$$[|\xi'_x| \frac{n}{(C_w \sqrt{\pi})^3} e^{-\frac{\xi_y'^2}{C_w^2}}]^{\frac{1}{2}} \times [|\xi_x| \frac{n}{(C_w \sqrt{\pi})^3} e^{-\frac{\xi_y^2}{C_w^2}}]^{-\frac{1}{2}} \times \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(\xi_x - \xi'_x)\delta(\xi_z - \xi'_z) e^{-\frac{\xi_y^2}{C_w^2}}$$

c'est à dire encore

$$\frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} |\xi'_x \xi_x| [e^{-\frac{\xi'_x{}^2}{2C_w^2}} e^{-\frac{\xi'_z{}^2}{2C_w^2}}] \times [e^{\frac{\xi_x^2}{2C_w^2}} e^{\frac{\xi_z^2}{2C_w^2}}] \times \delta(\xi_x - \xi'_x) \delta(\xi_z - \xi'_z) \times e^{-\frac{\xi'_y{}^2}{2C_w^2}} \times e^{-\frac{\xi_y^2}{2C_w^2}} .$$

Compte tenu des propriétés du dirac  $\delta$ , l'opérateur défini par cette dernière expression est le même que l'opérateur

$$\frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} |\xi'_x \xi_x| \times \delta(\xi_x - \xi'_x) \delta(\xi_z - \xi'_z) \times e^{-\frac{\xi'_y{}^2}{2C_w^2}} \times e^{-\frac{\xi_y^2}{2C_w^2}}$$

qui est le  $\mathcal{K}_y$  figurant dans les expressions (2.26). Finalement, l'opérateur  $\mathcal{B}$  déduit de l'opérateur global  $\mathcal{K}$  exprimé par la relation (2.25), correspond bien à l'opérateur  $\mathcal{B}$  obtenu par la démarche phénoménologique en (2.10).

L'idée introduite dans cette construction par formulation intégrale peut se résumer de la façon suivante : mise à part la première fonction propre connue qui reflète une situation d'équilibre, on ne peut avoir explicitement les expressions des autres fonctions propres sans recours à un choix arbitraire ; mais on peut relier convenablement le degré de dégénérescence de l'opérateur  $\mathcal{A}$  au degré de liberté du problème physique. Le problème élémentaire de l'interaction ayant trois degrés de liberté correspondant aux trois directions de l'espace, il s'introduit donc naturellement trois paramètres indépendants dans l'écriture des valeurs propres. Cet argument est à la base de l'écriture (2.22) qui constitue l'hypothèse essentielle de la construction. De plus cette hypothèse traduit le fait que les fonctions propres appartiennent à l'espace produit des trois espaces de Hilbert  $L^2(\Omega_j)$  qui est un espace dense dans  $L^2(\Omega)$ . D'un point de vue mathématique, on peut ajouter aussi que la seule loi de réflexion possible admettant une écriture de la forme (2.22) est celle dont le kernel  $\mathcal{B}$  est donné par les systèmes (2.10) ou (2.26). Si l'on avait supposé l'existence d'un seul degré de liberté, alors on aurait obtenu qu'une seule valeur propre multiple correspondant aux autres fonctions propres, et le résultat aurait conduit à l'opérateur de Maxwell. Or, le problème de l'interaction d'une particule simple avec une paroi solide n'a pas qu'un seul degré de liberté mais bien trois. De ce point de vue, l'opérateur décrit ici semble bien plus réaliste que l'opérateur de Maxwell.

Il faut remarquer qu'ici, la démarche exposée pour la construction du scattering kernel diffère d'une description classique suivant laquelle on décompose l'opérateur noyau sur une base ou un ensemble de polynômes arbitrairement choisi [108]. En effet, dans une démarche classique de décomposition sur une base de fonctions, à l'étape de la relation (2.17), on cherche l'opérateur sous une forme plus générale

$$K(\xi, \xi') = \sum_{n,m=0}^{\infty} \lambda^{nm} \varphi^n(\xi) \varphi^m(\xi') , \quad (2.27)$$

où les fonctions de base  $\varphi^n(\xi)$  et  $\varphi^m(\xi')$  n'ont plus l'obligation d'être des fonctions propres de  $\mathcal{A}$ , mais sont construites de façon arbitraire [6]. Par exemple, le modèle Cercignani-Lampis s'obtient dans le cadre de cette démarche en choisissant pour les fonctions  $\varphi^n(\xi)$  le produit d'un polynôme d'Hermite (de la composante tangentielle de  $\xi$ ) par un polynôme de Laguerre (construit sur le carré de la composante normale de  $\xi$ ) [5]. La nouvelle démarche proposée évite ce choix arbitraire de fonctions de base et reste dans le fil d'une expression de  $\mathcal{A}$  à l'aide de ses fonctions propres.

## 2.4 Les coefficients $\alpha_j$ et les coefficient $\mu_\kappa$

Dans la construction précédente, on a introduit des coefficients  $\mu_\kappa$  que nous avons ensuite exprimé en fonction de trois coefficients indépendants  $\alpha_j$ . Nous allons dans cette section identifier par calcul ces divers coefficients.

### 2.4.1 Les coefficients $\alpha_j$

Les coefficients  $\alpha_j$  sont supposés caractériser les trois degrés de liberté mais à ce stade on ne sait pas encore comment ils s'expriment en fonction des paramètres physiques habituels.

On définit usuellement le coefficient d'accommodation  $\beta(M_\chi)$  rattaché à une propriété cinétique  $M_\chi$ , par le rapport entre le flux de la quantité  $M_\chi$  réellement échangé par le gaz à la paroi, et le flux de cette quantité  $M_\chi$  qu'aurait échangé le gaz dans une situation d'accommodation parfaite [97] :

$$\beta(M_\chi) = \frac{\Phi^-(M_\chi) - \Phi^+(M_\chi)}{\Phi^-(M_\chi) - \Phi^e(M_\chi)}. \quad (2.28)$$

où  $\Phi^-(M_\chi)$  est le flux incident de la quantité  $M_\chi$  à la paroi,  $\Phi^+(M_\chi)$  est le flux réfléchi de la quantité  $M_\chi$ , et  $\Phi^e(M_\chi)$  le flux réfléchi de la même quantité  $M_\chi$  dans une situation d'accommodation totale à la paroi. Ces flux s'écrivent :

$$\Phi^-(M_\chi) = \int_{\Omega'} m|\xi'_x| M_\chi f^-(\xi') d\xi' \quad (2.29)$$

$$\Phi^+(M_\chi) = \int_{\Omega} m|\xi_x| M_\chi f^+(\xi) d\xi.$$

L'expression théorique d'un coefficient d'accommodation est donc liée au modèle d'interaction utilisé à travers l'expression de  $\Phi^+(M_\chi)$ . Utilisant la relation liant  $f^+$  et  $f^-$  (2.3) et le nouvelle opérateur (2.12)

$$\Phi^+(M_\chi) = \int_{\Omega'} m|\xi'_x| f^-(\xi') \sum_{\kappa} \mu_\kappa \left( \int_{\Omega} M_\chi B_\kappa(\xi', \xi) d\xi \right) d\xi'. \quad (2.30)$$

Pour le cas de l'accommodation parfaite,

$$\Phi^e(M_\chi) = \int_{\Omega'} m|\xi'_x| f^-(\xi') \left( \int_{\Omega} M_\chi \mathcal{B}_{dif}(\xi', \xi) d\xi \right) d\xi' \quad (2.31)$$

Il faut noter que la différence  $\Phi^-(M_\chi) - \Phi^+(M_\chi)$  ne représente le flux réellement échangé entre le gaz et la paroi que dans le cas où  $M_\chi$  est une propriété caractérisant l'ensemble des modes de la molécule, par exemple l'énergie totale. Dans les autres cas, cette différence peut inclure une redistribution du flux entre différents modes du gaz lors de la collision.

### le coefficient d'accommodation tangentiel, $\beta(\xi_y)$ et $\beta(\xi_z)$

La définition des coefficients d'accommodation tangentiels s'obtient en prenant comme propriété cinétique les composantes tangentielles de la quantité de mouvement,  $\xi_y$  et  $\xi_z$ .

Compte tenu de l'expression de  $\mathcal{B}_{dif}$  (2.7),  $\xi_y \mathcal{B}_{dif}(\xi', \xi)$  est impair en  $\xi_y$  et donc la somme  $\int_{\Omega} \xi_y \mathcal{B}_{xyz}(\xi', \xi) d\xi$  est nulle et  $\Phi^e(\xi_y)$  est aussi nul. Il vient alors

$$\beta(\xi_y) = 1 - \frac{\Phi^+(\xi_y)}{\Phi^-(\xi_y)},$$

Par ailleurs, dans la somme figurant dans la relation (2.30) on peut calculer séparément la contribution de chaque terme  $\int_{\Omega} \xi_y \mathcal{B}_{\kappa}(\xi', \xi) d\xi$ ; chacune de ces intégrales se calcule assez facilement et le résultat donne pour tout  $\kappa$ , soit zero soit  $\xi'_y$ . On obtient finalement

$$\sum_{\kappa} \mu_{\kappa} \int_{\Omega} \xi_y \mathcal{B}_{\kappa}(\xi', \xi) d\xi = \xi'_y (\mu_0 + \mu_x + \mu_z + \mu_{xz}),$$

et

$$\Phi^+(\xi_y) = (\mu_0 + \mu_x + \mu_z + \mu_{xz}) \Phi^-(\xi_y)$$

Il en résulte

$$\beta(\xi_y) = 1 - (\mu_0 + \mu_x + \mu_z + \mu_{xz})$$

ce qui compte tenu de la condition de normalisation, s'écrit encore

$$\beta(\xi_y) = \mu_y + \mu_{xy} + \mu_{yz} + \mu_{xyz}. \quad (2.32)$$

De même pour  $\beta(\xi_z)$  on obtient

$$\beta(\xi_z) = \mu_z + \mu_{xz} + \mu_{yz} + \mu_{xyz}. \quad (2.33)$$

Utilisant les expressions des  $\mu_{\kappa}$  données par les relations (2.14), les relations (2.32) et (2.33) conduisent à

$$\beta(\xi_y) = \alpha_y, \quad \text{et} \quad \beta(\xi_z) = \alpha_z$$

### le coefficient d'accommodation normal $\beta(|\xi_x|)$

Le coefficient d'accommodation normal s'obtient en prenant comme propriété cinétique la quantité  $|\xi_x|$ . Il vient donc,

$$\Phi^-(|\xi_x|) = \int_{\Omega'} m \xi_x'^2 f^-(\xi') d\xi' \quad (2.34)$$

Le calcul des intégrales partielles,  $\int_{\Omega} |\xi_x| \mathcal{B}_{\kappa}(\xi', \xi) d\xi$ , contenues dans l'intégrale de la relation (2.30) donne cette fois-ci  $(-\xi'_x)$  ou  $\frac{C_w \sqrt{\pi}}{2}$ . On obtient pour cette somme d'intégrales partielles

$$\begin{aligned} \sum_{\kappa} \mu_{\kappa} \int_{\Omega} \xi_x \mathcal{B}_{\kappa}(\xi', \xi) d\xi &= -\xi'_x (\mu_0 + \mu_y + \mu_z + \mu_{yz}) \\ &\quad + \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2} (\mu_x + \mu_{xy} + \mu_{xz} + \mu_{xyz}). \end{aligned}$$

Utilisant les expressions des flux (2.34) et (2.30), on trouve

$$\begin{aligned} \Phi^-(|\xi_x|) - \Phi^+(|\xi_x|) &= (1 - (\mu_0 + \mu_y + \mu_z + \mu_{yz})) \Phi^-(|\xi_x|) - \\ &\quad \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2} (\mu_x + \mu_{xy} + \mu_{xz} + \mu_{xyz}) \int_{\Omega'} m |\xi_x'| f^-(\xi') d\xi'. \end{aligned}$$

D'un autre côté on a

$$\int_{\Omega} \xi_x \mathcal{B}_{dif}(\xi', \xi) d\xi = \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2}$$

et

$$\Phi^-(|\xi_x|) - \Phi^e(|\xi_x|) = \Phi^-(|\xi_x|) - \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2} \int_{\Omega'} m |\xi'_x| f^-(\xi') d\xi'.$$

De l'utilisation de la condition de normalisation (2.13), il résulte

$$\beta(|\xi_x|) = \mu_x + \mu_{xy} + \mu_{xz} + \mu_{xyz}. \quad (2.35)$$

En exprimant les  $\mu_{\kappa}$  on obtient le résultat

$$\beta(|\xi_x|) = \alpha_x$$

**Les trois coefficients  $\alpha_x$ ,  $\alpha_y$ , et  $\alpha_z$  de l'opérateur  $B(\xi', \xi)$  que l'on a construit, correspondent donc aux trois coefficients d'accommodation des trois composantes de la quantité de mouvement.**

#### 2.4.2 les coefficients $\mu_{\kappa}$ et le coefficient de Maxwell $\alpha$

Dans la section 2.2.3, les  $\mu_{\kappa}$  représentent, par leur nature, le poids de chaque type d'accommodation élémentaire dans le processus complet de réflexion. Les coefficients  $\alpha_j$  sont pour leur part liés aux propriétés cinétiques de la particule. Ces deux types de coefficients sont donc de nature fondamentalement différente :  $\mu_{\kappa}$  est la densité de particules (ou le nombre de particules) réfléchies suivant l'accommodation de type  $\kappa$ , il ne représente donc pas un coefficient d'accommodation contrairement à  $\alpha_j$  qui représente un coefficient d'accommodation.

Le coefficient apparaissant dans l'opérateur de Maxwell (2.8) est lui aussi, par sa nature, un coefficient représentant le poids respectifs des deux types d'accommodation qui composent le processus de réflexion. Le coefficient  $\alpha$  de Maxwell est donc de la même nature que nos  $\mu_{\kappa}$ . Il représente le nombre de particules qui seraient réfléchies de façon complètement diffuse si la réflexion à la paroi se passait suivant la loi de Maxwell (2.8).

Néanmoins, lorsqu'on cherche à exprimer les coefficients d'accommodation par la loi de réflexion (2.8), on découvre à travers la définition (2.28), que tous les coefficients d'accommodation sont égaux à  $\alpha$ . Or, cette égalité de tous les coefficients d'accommodation n'est en réalité satisfaite que dans les deux situations extrêmement idéales : dans le cas de la réflexion spéculaire où il n'y a aucun échange, et dans le cas de l'accommodation complète où toutes les quantités cinétiques sont entièrement accommodées. Par conséquent, le modèle de Maxwell se présente comme un modèle trop schématique pour modéliser de façon réaliste les interactions gaz/paroi et cette trop grande schématisation du modèle est évidemment liée à la trop grande dégénérescence de son opérateur intégral  $\mathcal{A}$ . L'interprétation du coefficient unique de l'opérateur de Maxwell comme un coefficient d'accommodation, au sens de la définition (2.28), qui permet théoriquement de distinguer les accommodations des diverses propriétés cinétiques, n'est donc pas vraiment convaincante. En effet devant une paroi réelle, on peut mesurer expérimentalement des valeurs différentes pour ces différents coefficients d'accommodations. Le coefficient de Maxwell  $\alpha$  doit donc être compris dans son premier sens, c'est à dire comme la densité de particules qui seraient réfléchies de façon diffuse dans le cas où la réflexion des particules à la paroi se produirait suivant la description de Maxwell.



## Chapitre 3

# Généralisation de la construction du scattering kernel

Dans le chapitre précédent, on a d'abord donné une description de la réflexion à la paroi, différente de celle de Maxwell mais préservant le concept central de l'analyse de Maxwell, c'est à dire l'idée d'un processus où se combinent réflexion spéculaire et réflexion diffuse. La démarche aboutit à un opérateur de réflexion plus complet, décrivant plus finement le phénomène que ne le fait l'opérateur de Maxwell. On a vu ensuite que cet opérateur peut aussi se construire d'une manière systématique à partir d'une formulation intégrale et spectrale du problème de la réflexion à la paroi. Mais ces approches ne concernaient que les molécules monoatomiques.

Dans ce nouveau chapitre, nous présentons l'extension du modèle aux gaz polyatomiques. Les deux approches utilisées précédemment pour les molécules simples peuvent s'étendre au cas des molécules complexes. Mais il nous a paru plus pertinent pour illustrer l'esprit de la démarche, de présenter ici la généralisation de la méthode systématique basée sur les propriétés spectrales de l'opérateur intégral.

### 3.1 Conditions aux limites pour les gaz polyatomiques

#### 3.1.1 Formulation du problème

Dans le cas des gaz à molécules complexes, il convient d'associer aux trois paramètres cinétiques du cas monoatomique, les paramètres décrivant la structure interne des molécules gaz. Les paramètres nécessaires pour une telle description dépendent évidemment de la nature et de l'état des molécules. La description proposée ici concerne les molécules usuelles et convient parfaitement pour les molécules diatomiques. On verra qu'elle s'étend sans difficulté aux molécules plus complexes. On considère donc des molécules possédant un seul mode de rotation dégénéré et un seul mode de vibration ; elles peuvent être hors d'équilibre thermodynamique du point de vue de leur énergie interne. On néglige les effets du couplage entre les modes internes, et ceux de l'excitation des niveaux électroniques. Dans ces conditions les molécules seront décrites du point de vue interne par leur énergie de rotation  $E_{ir}$  et leur énergie de vibration  $E_{iv}$ . Les indices  $ir$  et  $iv$  sont des nombres quantiques relatifs aux niveaux d'énergie et sont donc des entiers naturels ;  $g_{ir}$  est le facteur de dégénérescence du mode de rotation.

Reprenons le problème de la réflexion des particules à la paroi que nous allons décrire à nouveau par un opérateur de réflexion représentant une densité de probabilité,

$$B(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}, \xi, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}) .$$

Tout comme dans le cas monoatomique, l'opérateur  $B$  est supposé indépendant de la distribution des particules incidentes et traduit le passage d'une molécule de l'état défini par  $(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'})$  à l'état défini par  $(\xi, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir})$ , lors de sa collision avec la paroi. Le problème est donc de construire la densité de probabilité  $B$ .

L'opérateur  $B$ , en tant que densité de probabilité, doit satisfaire aux conditions de normalisation et de positivité qui s'écrivent respectivement :

$$B(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}, \xi, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}) \geq 0 , \quad (3.1)$$

et

$$\sum_{ir, iv} \int_{\Omega} B(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}, \xi, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}) d\xi = 1 . \quad (3.2)$$

Si l'on admet que la description microscopique du système en interaction n'inclut que les vitesses microscopiques et les nombres quantiques, la généralisation de la condition de réciprocité déduite de l'hypothèse d'équilibre local de la paroi s'écrit [93]

$$\begin{aligned} |\xi'_x| e^{-\frac{\xi'^2}{C_w^2}} e^{-\frac{E_{ir'}}{kT_w}} e^{-\frac{E_{iv'}}{kT_w}} g_{ir'} B(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, \xi, E_{ir}, E_{iv}) = \\ \xi_x e^{-\frac{\xi^2}{C_w^2}} e^{-\frac{E_{ir}}{kT_w}} e^{-\frac{E_{iv}}{kT_w}} g_{ir} B(-\xi, E_{ir}, E_{iv}, -\xi', E_{ir'}, E_{iv'}) . \end{aligned} \quad (3.3)$$

Le bilan du flux des particules incidentes et réfléchies à la paroi, permet d'écrire la relation liant  $f_i^+$  et  $f_i^-$

$$\begin{aligned} \xi_x f_i^+(\xi, E_{ir}, g_{ir}, E_{iv}) = \\ \sum_{ir', iv'} \int_{\Omega'} |\xi'_x| f_i^-(\xi', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}) B(\xi', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}, \xi, E_{ir}, g_{ir}, E_{iv}) d\xi' , \end{aligned} \quad (3.4)$$

### 3.1.2 Formulation intégrale généralisée

Introduisons le changement d'opérateur suivant :

$$\begin{aligned} K(\xi, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}, \xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) = [|\xi'_x| F_{i_w}(\xi', E_{ir'}, E_{iv'})]^{\frac{1}{2}} \times [|\xi_x| F_{i_w}(\xi, E_{ir}, E_{iv})]^{-\frac{1}{2}} \\ \times B(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}, \xi, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}) \end{aligned} \quad (3.5)$$

où  $F_{i_w}(\xi, E_{ir}, E_{iv})$  est la distribution d'équilibre local de Maxwell-Boltzmann à la température  $T_w$ , définie par :

$$F_{i_w}(\xi, E_{ir}, E_{iv}) = \frac{n}{(C_w \sqrt{\pi})^3} e^{-\frac{\xi^2}{C_w^2}} \frac{g_{ir} e^{-\frac{E_{ir}}{kT_w}} e^{-\frac{E_{iv}}{kT_w}}}{Q_r(T_w) Q_v(T_w)} \quad (3.6)$$

avec

$$Q_r(T_w) = \sum_{ir} g_{ir} e^{-\frac{E_{ir}}{kT_w}} , \quad Q_v(T_w) = \sum_{iv} e^{-\frac{E_{iv}}{kT_w}} . \quad (3.7)$$

La construction de  $B$  se ramène à la construction équivalente de  $K$ .

Notons  $F_r$  l'ensemble des valeurs de l'énergie de rotation  $E_{ir}$ ,  $F_v$  l'ensemble des valeurs de l'énergie de vibration  $E_{iv}$ ; ensuite considérons les cinq espaces de Hilbert élémentaires,

$L^2(\Omega_\kappa)_{\kappa=x,y,z}$ ,  $L^2(F_r)$ , et  $L^2(F_v)$  des fonctions de carré sommable, relatives aux cinq paramètres d'état, avec leur produit scalaire associé défini par

$$\begin{aligned} \langle \varphi_{\kappa 1}, \varphi_{\kappa 2} \rangle_\kappa &= \int_{\Omega_\kappa} \varphi_{\kappa 1}(\xi) \varphi_{\kappa 2}(\xi) d\xi, \quad \text{pour tout } \varphi_{\kappa 1}, \varphi_{\kappa 2} \in L^2(\Omega_\kappa), \quad \kappa = x, y, z \\ \langle \varphi_{r 1}, \varphi_{r 2} \rangle_r &= \sum_{ir} \varphi_{r 1}(E_{ir}) \varphi_{r 2}(E_{ir}), \quad \text{pour tout } \varphi_{r 1}, \varphi_{r 2} \in L^2(F_r) \\ \langle \varphi_{v 1}, \varphi_{v 2} \rangle_v &= \sum_{iv} \varphi_{v 1}(E_{iv}) \varphi_{v 2}(E_{iv}), \quad \text{pour tout } \varphi_{v 1}, \varphi_{v 2} \in L^2(F_v). \end{aligned}$$

Soit  $\mathcal{L} = L^2(\Omega_x) \otimes L^2(\Omega_y) \otimes L^2(\Omega_z) \otimes L^2(F_r) \otimes L^2(F_v)$ , le produit tensoriel des cinq espaces de Hilbert élémentaires. L'espace produit  $\mathcal{L}$ , est un espace de Hilbert dense dans l'espace de Hilbert  $\mathcal{H} = L^2(\Omega) \otimes L^2(F_r) \otimes L^2(F_v)$  où le produit scalaire est défini par

$$\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle = \sum_{ir, iv} \int_{\Omega} \varphi_1(\xi, E_{ir}, E_{iv}) \varphi_2(\xi, E_{ir}, E_{iv}) d\xi \quad \text{pour tout } \varphi_1, \varphi_2 \in \mathcal{H}. \quad (3.8)$$

On considère maintenant l'opérateur intégral  $A$ , associé à  $K$  et défini sur l'espace  $\mathcal{H}$  par

$$A(\psi) = \sum_{ir', iv'} \int_{\Omega'} K(\xi, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}, \xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) \psi(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) d\xi' \quad (3.9)$$

On ramène ainsi la construction de l'opérateur  $B$  recherché, à la description de l'opérateur intégral  $A$ , sous les trois conditions de normalisation, de positivité, et de réciprocity. Cette formulation est une formulation intégrale (ou spectrale) du problème de scattering kernel.

### 3.1.3 Une méthode de construction systématique

Supposons que  $A$  admette une décomposition spectrale, et que ses fonctions propres appartiennent à l'espace de Hilbert produit  $\mathcal{L}$ , de sorte qu'on puisse écrire  $K$  sous la forme

$$K = \sum_{j_x, j_y, j_z, j_r, j_v=0}^{\infty} \lambda_{j_x, j_y, j_z, j_r, j_v} \psi_{j_x}(\xi_x) \psi_{j_y}(\xi_y) \psi_{j_z}(\xi_z) \psi_{j_r}(E_{ir}) \psi_{j_v}(E_{iv}) \psi_{j_x}(\xi'_x) \psi_{j_y}(\xi'_y) \psi_{j_z}(\xi'_z) \psi_{j_r}(E_{ir'}) \psi_{j_v}(E_{iv'}) \quad (3.10)$$

où les fonctions  $\psi_{j_x}(\xi_x) \psi_{j_y}(\xi_y) \psi_{j_z}(\xi_z) \psi_{j_r}(E_{ir}) \psi_{j_v}(E_{iv})$  sont les fonctions propres de  $A$  avec leur valeurs propres associées  $\lambda_{j_x, j_y, j_z, j_r, j_v}$ . A cause des conditions de positivité et de normalisation, les valeurs propres doivent être positives et inférieures ou égales à 1,  $\lambda_{j_x, j_y, j_z, j_r, j_v} \in [0, 1]$  pour tout  $j_x, j_y, j_z, j_r, j_v \in \mathbb{N}$ . De plus, étant donné que le produit scalaire induit par  $\mathcal{H}$  sur  $\mathcal{L}$ , n'est autre que le produit des produits scalaires élémentaires définis sur les cinq espaces élémentaires, on peut directement poser les valeurs propres sous la forme d'un produit  $\lambda_{j_x} \lambda_{j_y} \lambda_{j_z} \lambda_{j_r} \lambda_{j_v}$ . D'autre part, chaque ensemble de fonctions  $\psi_{j_\chi}(M_\chi)$ ,  $j_\chi \in \mathbb{N}$  figurant dans l'expression (3.10), est nécessairement une base de fonctions de l'espace de Hilbert élémentaire associé à  $\chi$ , pour tout  $\chi = x, y, z, r, v$ . Ainsi, l'expression (3.10) peut se réécrire comme un produit de cinq sommes infinies :

$$K = \prod_{\chi \in \{x, y, z, r, v\}} \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_{j_\chi} \psi_{j_\chi}(M_\chi) \psi_{j_\chi}(M'_\chi), \quad M_\chi = \xi_x, \xi_y, \xi_z, E_{ir}, E_{iv}. \quad (3.11)$$

Définissons  $\psi_0 = \psi_{0_x} \psi_{0_y} \psi_{0_z} \psi_{0_r} \psi_{0_v}$ , par

$$\begin{aligned} \psi_{0_x}(\xi_x) &= \frac{\sqrt{2}}{C_w} |\xi_x|^{\frac{1}{2}} e^{\frac{-\xi_x^2}{2C_w^2}}, & \psi_{0_y}(\xi_y) &= (C_w \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{-\xi_y^2}{2C_w^2}}, \\ \psi_{0_z}(\xi_z) &= (C_w \sqrt{\pi})^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{-\xi_z^2}{2C_w^2}}, & \psi_{0_r}(E_{ir}) &= \sqrt{\frac{g_{ir}}{Q_r(T_w)}} e^{-\frac{1}{2} \frac{E_{ir}}{kT_w}}, & \psi_{0_v}(E_{iv}) &= \frac{e^{-\frac{1}{2} \frac{E_{iv}}{kT_w}}}{\sqrt{Q_v(T_w)}}. \end{aligned}$$

On peut montrer que  $\psi_0$ , est une fonction propre de  $A$ . En effet, la condition de normalisation peut s'écrire sous la forme

$$\sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} B(-\xi, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}, -\xi'_R, E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) d\xi' = 1. \quad (3.12)$$

Intégrant la relation de réciprocité (3.3) en tenant compte de la relation (3.12) on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} |\xi'_x| f_0(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}) B(\xi'_R, E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}, \xi, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}) d\xi' \\ = |\xi_x| f_0(-\xi, E_{ir}, E_{iv}). \end{aligned} \quad (3.13)$$

Avec la relation (3.13), le calcul de  $A(\psi_0)$  conduit aisément à  $A(\psi_0) = \psi_0$ ; autrement dit la fonction  $\psi_0 = \psi_{0_x} \psi_{0_y} \psi_{0_z} \psi_{0_r} \psi_{0_v}$  ainsi définie, est une fonction propre de  $A$  associée à la valeur propre 1.

Introduisons maintenant une dégénérescence de l'opérateur  $A$ , liée aux cinq paramètres d'état du problème par les relations  $\lambda_{0_\chi} = 1$ ,  $\lambda_{j_\chi} = (1 - \alpha_\chi)$  pour tout  $j \neq 0$ , pour un  $\chi$  fixé ( $\chi = x, y, z, r, v$ ). La relation (3.11) devient

$$K = \prod_{\chi \in \{x, y, z, r, v\}} \left[ \psi_{0_\chi}(M_\chi) \psi_{0_\chi}(M'_\chi) + (1 - \alpha_\chi) \sum_{j=1}^{\infty} \psi_{j_\chi}(M_\chi) \psi_{j_\chi}(M'_\chi) \right]$$

qui peut se réécrire

$$K = \prod_{\chi \in \{x, y, z, r, v\}} \left[ \alpha_\chi \psi_{0_\chi}(M_\chi) \psi_{0_\chi}(M'_\chi) + (1 - \alpha_\chi) \sum_{j=0}^{\infty} \psi_{j_\chi}(M_\chi) \psi_{j_\chi}(M'_\chi) \right].$$

D'autre part l'ensemble de fonctions  $\psi_{j_\chi}(M_\chi)$ ,  $j_\chi \in \mathbb{N}$ , étant une base de fonctions de l'espace de Hilbert élémentaire associé à  $\chi$ , on a la propriété suivante

$$\sum_{j=0}^{\infty} \psi_{j_\chi}(M_\chi) \psi_{j_\chi}(M'_\chi) = \delta(M_\chi - M'_\chi)$$

De cette propriété il découle que  $K$  s'écrit

$$\begin{aligned} K &= \{ \alpha_x \psi_{0_x}(\xi_x) \psi_{0_x}(\xi'_x) + (1 - \alpha_x) \delta(\xi_x - \xi'_x) \} \\ &\times \{ \alpha_y \psi_{0_y}(\xi_y) \psi_{0_y}(\xi'_y) + (1 - \alpha_y) \delta(\xi_y - \xi'_y) \} \\ &\times \{ \alpha_z \psi_{0_z}(\xi_z) \psi_{0_z}(\xi'_z) + (1 - \alpha_z) \delta(\xi_z - \xi'_z) \} \\ &\times \{ \alpha_r \psi_{0_r}(\xi_r) \psi_{0_r}(\xi'_r) + (1 - \alpha_r) \delta(\xi_r - \xi'_r) \} \\ &\times \{ \alpha_v \psi_{0_v}(\xi_v) \psi_{0_v}(\xi'_v) + (1 - \alpha_v) \delta(\xi_v - \xi'_v) \}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Appliquant la transformation inverse de (3.5) sur ce dernier résultat, on obtient un opérateur  $B$  qui s'écrit

$$\begin{aligned} B(\xi', E_{ir'}, E_{iv}, g_{ir'}, \xi, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}) &= \left\{ (1 - \alpha_x) \delta(\xi'_x + \xi_x) + \alpha_x \frac{2\xi_x}{C_w^2} e^{-\frac{\xi_x^2}{C_w^2}} \right\} \\ &\times \left\{ (1 - \alpha_y) \delta(\xi'_y - \xi_y) + \alpha_y \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} e^{-\frac{\xi_y^2}{C_w^2}} \right\} \times \left\{ (1 - \alpha_z) \delta(\xi'_z - \xi_z) + \alpha_z \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} e^{-\frac{\xi_z^2}{C_w^2}} \right\} \\ &\times \left\{ (1 - \alpha_r) \delta(E_{ir'} - E_{ir}) + \alpha_r \frac{g_{ir}}{Q_r(T_w)} e^{-\frac{E_{ir}}{kT_w}} \right\} \times \left\{ (1 - \alpha_v) \delta(E_{iv'} - E_{iv}) + \alpha_v \frac{1}{Q_v(T_w)} e^{-\frac{E_{iv}}{kT_w}} \right\}. \end{aligned} \quad (3.15)$$

On notera, par la suite, cet opérateur (3.15) sous la forme simple condensée

$$B = P_x P_y P_z P_r P_v$$

où les  $P_x, P_y, P_z, P_r, P_v$  correspondent respectivement aux cinq facteurs figurant dans l'expression (3.15). On peut déjà remarquer que ces cinq facteurs sont tous normalisés dans leur espace élémentaire respectif et sont, en quelque sorte, des opérateurs de réflexion partiels correspondant aux différents modes cinétiques,

$$\int_0^{+\infty} P_x d\xi_x = \int_{-\infty}^{+\infty} P_y d\xi_y = \int_{-\infty}^{+\infty} P_z d\xi_z = \sum_{ir} P_r = \sum_{iv} P_v = 1. \quad (3.16)$$

### 3.1.4 Identification des cinq coefficients $\alpha_\chi$

Les cinq coefficients  $\alpha_\chi$  ont été introduits en postulant qu'il existe une liaison entre le nombre de paramètres d'état et le facteur de dégénérescence de l'opérateur  $A$ . Notons tout d'abord que les cinq  $\alpha_\chi$  ne sont pas les valeurs propres de l'opérateur  $A$ . Les valeurs propres de  $A$  sont l'ensemble des produits qu'on peut former avec le nombre 1 et les cinq facteurs  $(1 - \alpha_\chi)$  sans répétition des  $(1 - \alpha_\chi)$ . Avec une simple analyse combinatoire on trouve qu'il y en a 32 au total ; le facteur de dégénérescence de l'opérateur  $A$  est donc égal à 32.

#### Expression formelle des coefficients d'accommodation

Calculons les coefficients d'accommodation liés au cinq paramètres d'états  $M_\chi$ . La définition des coefficients d'accommodation est la même que celle donnée dans le cas monoatomique, que nous réécrivons ici

$$\beta(M_\chi) = \frac{\Phi^-(M_\chi) - \Phi^+(M_\chi)}{\Phi^-(M_\chi) - \Phi^e(M_\chi)}. \quad (3.17)$$

Les expressions des flux sont données par

$$\Phi^-(M_\chi) = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m |\xi'_x| M'_\chi f^-(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) d\xi' \quad (3.18)$$

$$\Phi^+(M_\chi) = \sum_{ir,iv} \int_{\Omega} m |\xi_x| M_\chi f^+(\xi, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}) d\xi \quad (3.19)$$

A l'aide de la relation (3.4) liant  $f_i^-$  à  $f_i^+$ , le flux réfléchi  $\Phi^+(M_\chi)$  s'écrit

$$\Phi^+(M_\chi) = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m |\xi'_x| f^-(\xi', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}) \left[ \sum_{ir,iv} \int_{\Omega} M_\chi P_x P_y P_z P_r P_v d\xi \right] d\xi'. \quad (3.20)$$

D'autre part le flux réfléchi dans le cas d'une accommodation complète s'écrit

$$\Phi^e(M_\chi) = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m |\xi'_x| f^-(\xi', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}) \left[ \sum_{ir,iv} \int_{\Omega} M_\chi B_{i_{dif}} d\xi \right] d\xi' \quad (3.21)$$

où  $B_{i_{dif}}$  est l'opérateur de réflexion totalement diffuse, pour un gaz polyatomique, et qui s'exprime par

$$B_{i_{dif}} = \frac{2g_{ir}}{Q_r(T_w)Q_v(T_w)C_w^A \pi} \xi_x e^{-\frac{\xi^2}{C_w^2}} e^{-\frac{E_{ir}}{kT_w}} e^{-\frac{E_{iv}}{kT_w}} \quad (3.22)$$

### Calcul de $\beta(\xi_z)$ et $\beta(\xi_y)$

Considérons le cas  $M_\chi = \xi_y$ . Alors on peut voir aisément que  $\Phi^e(\xi_y)$  s'annule. Grace aux propriétés de la relation (3.16), le calcul de  $\Phi^+(\xi_y)$  conduit à partir de la relation (3.20), avec  $M_\chi = \xi_y$ , donne

$$\Phi^+(\xi_y) = (1 - \alpha_y) \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m \xi_y' | \xi_x' | f^-(\xi', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}) d\xi' = (1 - \alpha_y) \Phi^-(\xi_y) .$$

Il résulte automatiquement de la définition (3.17)

$$\beta(\xi_y) = 1 - \frac{\Phi^+(\xi_y)}{\Phi^-(\xi_y)} = \alpha_y .$$

De la même façon on trouve

$$\beta(\xi_z) = 1 - \frac{\Phi^+(\xi_z)}{\Phi^-(\xi_z)} = \alpha_z .$$

### Calcul de $\beta_x$

Considérons maintenant le cas  $M_\chi = | \xi_x |$ .

A partir des relations (3.16) et de l'expression de l'opérateur partiel  $P_x$ , on obtient

$$\sum_{ir,iv} \int_{\Omega} | \xi_x | P_x P_y P_z P_r P_\xi d\xi = -(1 - \alpha_x) \xi_x' + \alpha_x \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2}$$

Il vient alors à partir de (3.20)

$$\Phi^+(|\xi_x|) - \Phi^-(|\xi_x|) = \alpha_x \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m |\xi_x'| f^-(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) (\xi_x' + \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2}) d\xi' .$$

D'autre part le calcul de  $\Phi^e(\xi_x)$  conduit à

$$\Phi^e(|\xi_x|) - \Phi^-(|\xi_x|) = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m |\xi_x'| f^-(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) (\xi_x' + \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2}) d\xi' .$$

On en déduit finalement en utilisant la relation (3.17)

$$\beta_x = \alpha_x$$

### Calcul de $\beta(E_{ir})$ et $\beta(E_{iv})$

Examinons le cas  $M_\chi = E_{ir}$ .

Toujours avec l'aide des propriétés (3.16) et des expressions des opérateurs partiels on obtient

$$\sum_{ir,iv} \int_{\Omega} E_{ir} P_x P_y P_z P_r P_v dV = \sum_{ir} E_{ir} P_r = (1 - \alpha_r) E_{ir'} + \alpha_r E_{r_w}$$

où

$$E_{r_w} = \frac{1}{Q_r(T_w)} \sum_{ir} g_{ir} E_{ir} e^{-\frac{E_{ir}}{kT_w}} .$$

A partir de ce résultat l'expression de  $\Phi^+(E_{ir})$  conduit à

$$\Phi^-(E_{ir}) - \Phi^+(E_{ir}) = \alpha_r \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m |V_x'| f^-(V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) (E_{ir'} - E_{r_w}) dV' .$$

Avec l'expression (3.22) de  $B_{dif}$ , on a

$$\sum_{ir,iv} \int_{\Omega} E_{ir} B_{dif} d\xi = E_{r_w}$$

et

$$\Phi^-(E_{ir}) - \Phi^e(E_{ir}) = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m |\xi_x'| f^-(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) (E_{ir'} - E_{r_w}) d\xi'$$

Il vient donc,

$$\beta_r = \alpha_r$$

De la même façon, avec  $M_\chi = E_{iv}$ , on trouve

$$\beta_v = \alpha_v .$$

**Les cinq coefficients  $\alpha_x$ ,  $\alpha_y$ ,  $\alpha_z$ ,  $\alpha_r$ , et  $\alpha_v$  figurant dans l'opérateur  $B$  qui a été construit pour les gaz polyatomiques sont donc les cinq coefficients d'accommodation des cinq paramètres d'états caractérisant l'état cinétique des particules, à savoir, les trois composantes de la quantité de mouvement et les énergies internes des particules.**

### 3.1.5 Le coefficient d'accommodation de l'énergie de translation

On considère dans cette partie le cas du coefficient d'accommodation de l'énergie de translation; on pose donc  $M_\chi = V^2$  dans les définitions (3.17.) On a alors, en tenant compte des propriétés (3.16)

$$\Phi^-(V^2) = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m |\xi_x'| V'^2 f^-(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) d\xi' , \quad (3.23)$$

$$\Phi^+(V^2) = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m |\xi_x'| f^-(\xi', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}) \left[ \int_{\Omega} V^2 P_x P_y P_z d\xi \right] d\xi' , \quad (3.24)$$

et

$$\Phi^e(V^2) = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m |\xi_x'| f^-(\xi', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}) \left[ \int_{\Omega} V^2 B_{dif} d\xi \right] d\xi' \quad (3.25)$$

Dans la relation (3.24), l'intégrale entre crochets apparaîtra à plusieurs reprises dans les relations des chapitres suivants; son calcul détaillé est présenté dans les Annexes et le résultat est donné par

$$\int_{\Omega} V^2 B(\xi', \xi) d\xi = V'^2 - \alpha_x V_x'^2 - \alpha_y V_y'^2 - \alpha_z V_z'^2 + \sigma_0 C_w^2 + \alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2 . \quad (3.26)$$

avec  $\sigma_0 = \alpha_x + \frac{1}{2}(\alpha_y + \alpha_z)$ . De même, dans la relation (3.25), l'intégrale entre crochets est calculée dans les Annexes et donne

$$\int_{\Omega} V^2 B_{dif} d\xi = 2C_w^2 + U^2 . \quad (3.27)$$

On peut alors se rendre compte, en reportant ces résultats dans les expressions du flux réfléchi et du flux réfléchi en situation d'accommodation parfaite, qu'on ne peut déduire une forme explicite du coefficient d'accommodation de l'énergie sans avoir connaissance de l'expression de la fonction de distribution incidente.

En prenant une distribution de Maxwell-Boltzmann à la vitesse de la paroi (donc  $U = 0$ ), pour la distribution incidente, on trouve (Cf. les Annexes)

$$\Phi^-(V^2) - \Phi^+(V^2) = \frac{mnC_0\sigma_0}{2\sqrt{\pi}}(C_0^2 - C_w^2)$$

$$\Phi^-(V^2) - \Phi^e(V^2) = \frac{mnC_0}{\sqrt{\pi}}(C_0^2 - C_w^2)$$

On peut donc affirmer la proposition suivante :

**Dans le cas où la distribution incidente est une distribution de Maxwell-Boltzmann (ou simplement une Maxwellienne pour les monoatomiques), le coefficient d'accommodation de l'énergie de translation est donnée par  $\frac{\sigma_0}{2} = \frac{1}{2}\alpha_x + \frac{1}{4}(\alpha_y + \alpha_z)$ .**

## 3.2 Autre expression de l'opérateur de réflexion : opérateurs élémentaires

Sous sa forme factorisée, le nouvel opérateur de réflexion est assez facile à manipuler dans les calculs notamment grâce aux propriétés de la relation (3.16). Mais, pour mieux en comprendre le sens et mieux l'interpréter, il est plus intéressant de le réécrire sous d'autres formes beaucoup plus expressives.

Introduisons les notations suivantes :

$$\begin{aligned} \tilde{P}_0 &= \delta(E_{ir'} - E_{ir})\delta(E_{iv'} - E_{iv}) , & \tilde{P}_{rv} &= \frac{e^{-\frac{E_{ir}}{kT_w}}}{Q_r(T_w)} g_{ir} \frac{e^{-\frac{E_{iv}}{kT_w}}}{Q_v(T_w)} , \\ \tilde{P}_v &= \delta(E_{ir'} - E_{ir}) \frac{e^{-\frac{E_{iv}}{kT_w}}}{Q_v(T_w)} , & \tilde{P}_r &= \frac{e^{-\frac{E_{ir}}{kT_w}}}{Q_r(T_w)} g_{ir} \delta(E_{iv'} - E_{iv}) , \end{aligned} \quad (3.28)$$

Un développement partiel des facteurs de (3.16) donne l'écriture suivante de  $B$

$$\begin{aligned} B &= \left( (1 - \alpha_r)(1 - \alpha_v)\tilde{P}_0 + \alpha_v(1 - \alpha_r)\tilde{P}_v + \alpha_r(1 - \alpha_v)\tilde{P}_r + \alpha_v\alpha_r\tilde{P}_{rv} \right) \\ &\quad \times \sum_{\kappa} \mu_{\kappa} \mathcal{B}_{\kappa}(\xi', \xi) , \end{aligned} \quad (3.29)$$

La combinaison linéaire des  $\mathcal{B}_{\kappa}$  qui apparaît dans le second membre de (3.29) n'est autre que l'opérateur écrit dans le cas monoatomique. Le développement complet de  $B$  donne une combinaison linéaire de 32 opérateurs  $\mathcal{B}_{\kappa}\tilde{P}_{in}$ , produits des  $\mathcal{B}_{\kappa}(\xi', \xi)$  par les éléments définis par les relations (3.28). Chacun des opérateurs  $\mathcal{B}_{\kappa}\tilde{P}_{in}$  de la combinaison satisfait les trois conditions requises pour un scattering kernel. Ces 32 opérateurs de réflexion élémentaires représentent donc les différents types de réflexion possible à la paroi.



### 3.3 Opérateurs de réflexion sur des surfaces isotropes

Dans l'expression de l'opérateur construit dans le cas monoatomique il apparaissait trois coefficients d'accommodation correspondant plus ou moins aux trois directions de l'espace, mais seuls deux coefficients d'accommodations sont évoqués de façon usuelle : le coefficient normal et le coefficient tangentiel.

Les coefficients d'accommodation sont des caractéristiques des éléments du couple gaz/paroi en présence. Par conséquent, ils dépendent naturellement des propriétés de la surface, soit de sa température, de sa rugosité, de sa nature physique et chimique etc. Face à certaines surfaces, la réflexion des particules à la surface de la paroi peut être considérée comme invariante par rotation suivant tout axe normal à la paroi. On désigne ces types de surfaces sous le terme de surfaces isotropes. La propriété d'isotropie se définit plus précisément par l'invariance de l'opérateur de réflexion par rotation autour de tout axe normal à la paroi. Dans les cas des opérateurs décrits dans ce chapitre et au chapitre précédent, cela se traduit par l'égalité des deux coefficients des axes du plan de la paroi. Soit,

$$\alpha_y = \alpha_z . \quad (3.30)$$

L'hypothèse d'isotropie de la surface est implicitement admise chaque fois qu'on traite la réflexion dans le plan de la paroi par un seul coefficient d'accommodation tangentiel ; sans cette hypothèse l'accommodation devrait dépendre de l'orientation de la vitesse tangentielle des particules incidentes dans le plan de la paroi. Le caractère éventuellement anisotrope de la surface n'est presque jamais prise en compte et il faut souligner que le nouveau modèle permet de décrire la réflexion sur de telles surfaces.

Il faut remarquer aussi que l'isotropie de la paroi, ne traduit pas l'égalité du coefficient d'accommodation tangentiel avec le coefficient d'accommodation normal. Une telle égalité traduirait l'isotropie du processus d'accommodation tout entier. Dans une telle situation, il s'agirait de l'invariance de la réflexion suivant n'importe quel axe (normal ou pas à la surface). Cette isotropie globale de tout le processus d'accommodation est ce qu'exprime l'opérateur de réflexion de Maxwell ; et cela ne semble pas très réaliste si l'on considère les rôles nettement différents que jouent respectivement la direction normale et les directions tangentes à la paroi dans le processus de réflexion.

### 3.4 Commentaires :

#### 3.4.1 sur la méthode de description spectrale en théorie du scattering kernel

La démarche systématique qui a été suivie pour déduire la loi de réflexion des particules à la paroi s'inscrit dans le fil de la recherche d'un opérateur admettant une description spectrale et dont la dégénérescence serait liée aux nombres de degrés de liberté du problème. L'écriture (3.15) ainsi que toute la démarche conduisant à ce résultat, peuvent facilement être reprises dans des cas où l'on considère des molécules dont la structure est plus compliquée : par exemple si on considère l'existence de plusieurs modes d'énergies de rotation avec différentes types de dégénérescence ou encore plusieurs modes de vibrations ( $CO_2$ ). L'écriture de l'opérateur serait analogue à celle de la relation (3.15) avec des facteurs supplémentaires correspondant aux nouveaux modes internes et à leur coefficients d'accommodation propres. Ce type de description attribue donc naturellement un coefficient d'accommodation, à chaque paramètre décrivant l'état microscopique des particules, coefficient qui se retrouve dans les valeurs propres partielles correspondant à chaque mode,

à l'opposé de certains modèles où les paramètres fixés *ab initio*, sont souvent difficiles à interpréter.

### 3.4.2 sur les coefficients d'accommodation constants

Les définitions de la relation (3.17) ne sont pas les seules façons de définir des coefficients d'accommodation dans le domaine de l'interaction gaz/paroi. On peut en définir d'autres formes, notamment des coefficients dépendant de la vitesse incidente des particules [97, 5, 61]. Mais, parmi les diverses définitions, l'expression (3.17) est celle qui paraît compatible avec une description de l'interaction gaz/paroi basée sur une formulation intégrale et une construction de l'opérateur par une démarche spectrale.

En effet, l'un des arguments avancé au départ de cette formulation, est la non dépendance de l'opérateur par rapport à la distribution des particules incidentes (ce qui sous entend que toute particule entre seule en collision avec la paroi). Ensuite, dans les décompositions utilisées (3.10), les valeurs propres, et donc les coefficients d'accommodations, sont par nature indépendants de la vitesse incidente des particules. Par conséquent les coefficients de l'opérateur de réflexion (3.15) sont des coefficients constants vis-à-vis de la vitesse incidente des particules, et nécessairement compris entre 0 et 1. Ce formalisme, n'autorise donc pas la présence de coefficients d'accommodation dépendant de la vitesse (cinétique) incidente des particules comme le suggère certains auteurs (Cf. *Epstein* [61]). En d'autres termes, les coefficients d'accommodation qui s'accordent avec une telle description dépendent bien entendu des paramètres macroscopiques (à savoir température, vitesse macroscopique, rugosité, énergie moyenne, angle d'incidence du flux incident) mais ne sont pas des fonctions des quantités microscopiques (à savoir vitesse cinétique, distribution, énergie interne d'une particule, angle d'incidence d'une vitesse cinétique.)

En revanche, comme l'a vu plus haut, il existe des formes de modélisation de l'interaction gaz/paroi, où l'on peut effectivement introduire des coefficients qui dépendent de la vitesse (incidente) et qui ne sont plus forcément compris entre 0 et 1. Ces coefficients d'accommodation sont pour leur part bien adaptés aux descriptions de l'interaction gaz/paroi qui impliquent directement l'état cinétique des particules incidentes : par exemple, lorsqu'on se place dans le domaine du "molecular beam" où les expériences consistent à envoyer un faisceau de particules monocinétiques, de vitesse (cinétique) incidente connue, sur une paroi, et à analyser la répartition réfléchié suivant les propriétés du faisceau et les propriétés de la paroi.

## Chapitre 4

# Conditions aux limites hydrodynamiques

Dans ce chapitre on considère le problème de saut de température et de glissement de vitesse en terme de recherche de conditions aux limites pour les équations de Navier Stokes dans le régime dit des écoulements glissants. On présente une méthode pour établir des relations de saut de températures et de vitesse de glissement à la paroi en se basant sur les conditions aux limites cinétiques établies aux chapitres précédents. La première partie concerne le cas monoatomique et la deuxième partie est dévolue aux gaz polyatomiques.

### 4.1 Flux de chaleur et température du gaz au contact d'une paroi

En mécanique des fluides ordinaire, décrite par les équations de Naviers Stokes, les conditions de non glissement du fluide sur la paroi et la condition de continuité de la température à travers l'interface fluide/solide, passent pour des hypothèses standard, admises par tous. Aussi, après les premières découvertes sur les phénomènes de glissement de vitesse et sur les sauts de température à la paroi, la recherche de formules théoriques pour le saut de température et pour la vitesse de glissement n'a pas été directement formulée en terme de conditions aux limites pour les équations de Navier Stokes, mais plutôt comme la recherche de formules indépendantes valables pour des configurations d'écoulement assez particulières. La formulation classique du problème de saut de température à la paroi se présente comme un problème de conduction de chaleur à travers une paroi soumise à un flux de chaleur constant à la paroi. On arrive ainsi à une relation de saut de température due uniquement à un gradient de température à la paroi. On pose de façon similaire la question du glissement de vitesse, connue sous le nom de problème de Kramer [6], où on considère cette fois-ci un gradient de vitesse dans un écoulement isotherme près d'une paroi, et où il s'agit de décrire le profil de vitesse. Évidemment l'échelle caractérisant ces configurations est celle du libre parcours moyen, qui correspond à l'échelle spatiale sur laquelle est utilisée l'équation de Boltzmann.

Dans cette partie, on adopte une démarche particulière pour la description des discontinuité à la paroi. On utilise alors directement les conditions aux limites cinétiques établies précédemment, pour rechercher les conditions aux limites sur les quantités macroscopiques du gaz au contact de la paroi. Pour expliciter les différentes expressions calculées au contact de la paroi on utilise, comme exemple, une forme de distribution de Chapman-Enskog pour

les particules incidentes. Une telle démarche permet d'obtenir des conditions aux limites hydrodynamiques dépendant d'une manière plus complète des différents gradients, ce qui présente un intérêt particulier dans les écoulements microfluidiques où la variation de ces gradients peut être très sensible.

Dans la dernière partie du chapitre, on discute des corrections qu'on peut apporter à ces nouvelles relations établies à partir d'une distribution incidente de type Chapman Enskog, par la prise en compte des perturbations de la fonction de distribution incidente par les effets de la couche de Knudsen.

#### 4.1.1 Méthode pour la température au contact de la paroi

L'expression de la température du gaz au contact de la paroi peut s'obtenir à l'aide d'un bilan de flux à la paroi. A partir de la loi de réflexion des particules sur la paroi et des définitions de théorie cinétique, on peut calculer directement, une expression du flux de chaleur au contact de la paroi, en se donnant une expression de fonction de distribution incidente. En exprimant ensuite le flux de chaleur par une loi macroscopique, on peut déduire une écriture de la température du gaz au contact de la paroi. En somme, si  $Q_0$  désigne le flux de chaleur normal calculé par la théorie cinétique à la paroi et  $\vec{Q}$  le vecteur flux de chaleur, alors on peut écrire :

$$\vec{Q} \cdot \vec{n} = Q_0 . \quad (4.1)$$

En utilisant la loi de Fourier pour exprimer le flux de chaleur,  $\vec{Q}$  s'écrit

$$\vec{Q} \cdot \vec{n} = -(-\lambda_c \nabla T) = \lambda_c \frac{\partial T}{\partial x} , \quad (4.2)$$

d'autre part, la définition de  $Q_0$  par la théorie cinétique s'explicite par

$$Q_0 = \int_{\Omega'} \left[ \frac{1}{2} m |V'_x| V'^2 f^- \right] d\xi' - \int_{\Omega} \left[ \frac{1}{2} m |V_x| V^2 f^+ \right] d\xi . \quad (4.3)$$

En utilisant la relation liant  $f^+$  et  $f^-$ , ce flux local s'écrit

$$Q_0 = \int_{\Omega'} \left[ \frac{1}{2} m |V'_x| V'^2 f^- \right] d\xi' - \int_{\Omega'} \left[ \frac{1}{2} m |V'_x| f^- \int_{\Omega} V^2 B(\xi', \xi) d\xi \right] d\xi' . \quad (4.4)$$

Le calcul du terme  $\int_{\Omega} V^2 B(\xi', \xi) d\xi$  peut se faire séparément en utilisant l'opérateur de chapitre 2 ; ce calcul effectué dans les Annexes est donné par la relation (3.26) du chapitre précédent. Il vient alors

$$Q_0 = \frac{1}{2} m \int_{\Omega'} \left[ \left( \alpha_x V_x'^2 + \alpha_y V_y'^2 + \alpha_z V_z'^2 \right) - \sigma_0 C_w^2 - \alpha_y U_y^2 - \alpha_z U_z^2 \right] |V'_x| f^- dV' . \quad (4.5)$$

L'expression (4.5) est l'expression générale du flux de chaleur qu'on obtient, à partir de la définition de la théorie cinétique, en utilisant la loi de réflexion du chapitre 2. Pour déduire une expression plus explicite de ce flux, il faut se donner une distribution de particules incidentes. On considère, dans cette partie, une fonction de distribution complète de Chapman Enskog, plus exactement la distribution complète qui conduit aux équations de Navier Stokes.

On écrit alors,

$$f^- = F_0 [1 + \varphi(V')] \quad (4.6)$$

où  $\varphi(V')$  est la déviation par rapport à la distribution d'équilibre local, qui s'écrit sous sa forme complète dans le cas d'un gaz monoatomique [21]

$$\varphi(V') = \frac{m}{kT_0} \left[ \frac{\lambda_c}{nkT_0} \nabla T \cdot V' \left( 1 - \frac{2}{5C_0^2} V'^2 \right) + \frac{\mu}{nkT_0} (V'_i V'_j - \frac{1}{3} V'^2 \mathbb{I}) : \frac{\partial U_i}{\partial X_j} \right]. \quad (4.7)$$

Notons

$$Q_0 = Q_{0M} + Q_{0\varphi}, \quad (4.8)$$

où  $Q_{0M}$  est la partie de l'expression du flux de chaleur  $Q_0$ , provenant de  $f_0(V')$  et  $Q_{0\varphi}$  la partie provenant de  $\varphi(V')$ . on a,

$$Q_{0M} = \frac{1}{2} m \int_{\Omega'} \left[ \left( \alpha_x V_x'^2 + \alpha_y V_y'^2 + \alpha_z V_z'^2 \right) - \sigma_0 C_w^2 - \alpha_y U_y^2 - \alpha_z U_z^2 \right] |V'_x| f_0(V') dV'. \quad (4.9)$$

et

$$Q_{0\varphi} = \frac{1}{2} m \int_{\Omega'} \left[ \left( \alpha_x V_x'^2 + \alpha_y V_y'^2 + \alpha_z V_z'^2 \right) - \sigma_0 C_w^2 - \alpha_y U_y^2 - \alpha_z U_z^2 \right] |V'_x| f_0(V') \varphi(V') dV'. \quad (4.10)$$

Les calculs de  $Q_{0M}$  et  $Q_{0\varphi}$  qui sont relativement longs mais totalement indépendants sont détaillés dans les Annexes pour alléger la présentation. On obtient

$$Q_{0M} = \frac{mnC_0}{4\sqrt{\pi}} \sigma_0 (C_0^2 - C_w^2) - \frac{mnC_0}{4\sqrt{\pi}} (\alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2) \quad (4.11)$$

et

$$Q_{0\varphi} = \frac{\sigma_1 m \lambda_c}{20 k T_0} C_0^2 \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\mu m C_0}{12 k T_0 \sqrt{\pi}} (\sigma_0 C_w^2 + \alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2) \left[ 3 \frac{\partial U_x}{\partial x} - \nabla \cdot U \right] + \frac{\mu m C_0^3}{4 k T_0 \sqrt{\pi}} \left[ 3 \alpha_x \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\alpha_y - \alpha_z}{2} \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\alpha_z - \alpha_y}{2} \frac{\partial U_z}{\partial z} \right] \quad (4.12)$$

#### 4.1.2 Conditions aux limites sur la température

En portant dans l'égalité (4.1) l'expression du flux  $Q_0$  donnée par les relations (4.11) et (4.12), et en tenant compte de (4.2), on tire  $C_0^2 - C_w^2$ . Ensuite, à travers la relation  $C_0^2 - C_w^2 = \frac{2k}{m}(T_0 - T_w)$ , on obtient

$$(T_0 - T_w) - \frac{\mu}{nk} \left( \frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{1}{3} \nabla \cdot U \right) \left[ \frac{T_w}{T_0} + \frac{1}{\sigma_0 C_0^2} (\alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2) \right] = \frac{\lambda_c \sqrt{\pi}}{nk C_0} \left( \frac{2 - \frac{\sigma_1}{5}}{\sigma_0} \right) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\mu}{nk} \left[ \frac{3\alpha_x}{\sigma_0} \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\alpha_y - \alpha_z}{2\sigma_0} \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\alpha_z - \alpha_y}{2\sigma_0} \frac{\partial U_z}{\partial z} \right] + \frac{T_0}{\sigma_0 C_0^2} (\alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2). \quad (4.13)$$

La relation ainsi écrite, est l'expression du saut de température entre le gaz et la paroi. Mais, la façon dont nous avons procédé à ce calcul présuppose certaines hypothèses.

D'une part, dans la relation (4.13), il n'y a pas de distinction entre les gradients à l'entrée de la couche de Knudsen et les gradients au contact de la paroi. Autrement dit, les gradients présents dans la relation (4.13), sont tous confondus avec les gradients pris en  $x = 0$  à l'échelle macroscopique, ou encore avec ceux qu'on désignerait comme les gradients de l'écoulement extérieur à la couche de Knudsen, gouverné par les équations de Navier

Stokes. L'application de l'égalité (4.1) où figure la loi de Fourier suppose une conservation du flux de chaleur normal à la paroi à travers la couche. Cette conservation du flux à travers la couche de Knudsen, admise par de nombreux auteurs, est la conséquence d'une faible variation des grandeurs macroscopiques comme température et densité à travers cette couche du fait de sa faible épaisseur [63, 72, 57].

D'autre part, l'utilisation de la distribution du régime de Navier de Stokes comme distribution incidente, adoptée par certains auteurs [51, 64, 78], s'interprète par une faible perturbation de la fonction de distribution incidente sous l'effet de collision particule/particule dans la couche de Knudsen elle-même. Ce choix n'est pas incohérent si on estime, comme *Cercignani*, que la notion de saut à la paroi a un sens à l'échelle d'un écoulement extérieur décrite par l'approximation de Navier Stokes [5]. Il est à noter tout de même que ces hypothèses ne peuvent être pour l'heure être prises comme des approximations toujours quantitativement correctes de la couche de Knudsen

### 4.1.3 Analyse de la condition aux limites sur la température

L'expression (4.13) est une expression tridimensionnelle de la condition aux limites sur la température, basée sur une fonction de distribution correspondant au régime de Navier Stokes, prise comme distribution des particules incidentes à la paroi. Il apparaît que cette condition aux limites hydrodynamique possède une structure analogue à celle de l'équation de l'énergie en régime de Navier Stokes. Le deuxième terme dans le membre de gauche et le deuxième terme dans le membre de droite peuvent être associés aux effets visqueux à la paroi. Ces termes évoquent les effets de compressibilité du fluide et éventuellement les effets d'une anisotropie de la surface sur le saut de température. Le premier terme dans le membre de droite où figure le gradient de température est évidemment la partie du saut de température associée à la conduction de la chaleur. Dans les calculs des sauts de température effectués pour des configurations de fluide au repos [65, 91], c'est cette partie du saut de température que l'on retrouve essentiellement.

Ainsi à travers l'écriture plus générale (4.13), on peut dire que le saut de température est une expression plus complexe incluant des contributions d'échauffement visqueux et des effets de la compressibilité du fluide. Dans certaines gammes d'écoulements comme dans le domaine de la microfluidique, la contribution de ces termes en gradients de vitesses peut devenir non négligeable [66]. Dans les deux membres de la relation (4.13), les deux termes, où figure le carré des composantes de la vitesse de glissement ( $U_y^2, U_z^2$  en  $x = 0$ ), peuvent être aussi associés à une transformation d'énergie mécanique du fluide en flux de chaleur : néanmoins dans la plupart des écoulements du régime des écoulements glissants, on estime que la vitesse de glissement est faible devant la vitesse d'agitation thermique des particules c'est pourquoi cette dernière contribution est généralement négligeable ; en microfluidique notamment où les écoulements sont à très bas nombre de Mach, on peut supposer en toute sécurité que ( $U_y^2, U_z^2 \ll C_0^2$ ). Cette hypothèse a été admise aussi par divers auteurs (*Scott, Gupta, Shidlovsky, Patterson, et al*) [79], dans le domaine de recherche aérospatiale. En négligeant ces termes en vitesse de glissement, la relation de saut (4.13) s'écrit plus simplement

$$(T_0 - T_w) = \frac{\lambda_c \sqrt{\pi}}{nkC_0} \left( \frac{2 - \frac{\sigma_1}{5}}{\sigma_0} \right) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\mu}{nk} \left( \frac{3\alpha_x}{\sigma_0} - \frac{2T_w}{3T_0} \right) \frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{\mu T_w}{3nkT_0} \left( \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z} \right) - \frac{\mu}{nk} \left[ \frac{\alpha_y - \alpha_z}{2\sigma_0} \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\alpha_z - \alpha_y}{2\sigma_0} \frac{\partial U_z}{\partial z} \right]. \quad (4.14)$$

Le coefficient  $\left(\frac{2-\frac{\sigma_1}{\sigma_0}}{2}\right)$ , figurant ici devant le terme de gradient de température, remplace le coefficient  $\left(\frac{2-\sigma_T}{\sigma_T}\right)$  figurant dans les expressions plus classiques du saut de température [11, 65, 78], où  $\sigma_T$  est associé au coefficient d'accommodation de l'énergie. Ce coefficient classique n'est en réalité que la signature d'une description de type Maxwell de l'interaction des particules avec la paroi. De ce point vue, même si ce coefficient  $\sigma_T$  est généralement associé à l'accommodation de l'énergie, il n'en demeure pas moins "le" coefficient d'accommodation de Maxwell et à ce titre s'identifie à tout coefficient d'accommodation. En revanche le coefficient  $\frac{\sigma_0}{2}$ , figurant dans la nouvelle relation, est égal au coefficient d'accommodation de l'énergie dans le cas où la distribution des particules incidentes est supposée Maxwellienne (Voir la démonstration à la page 49). On a ainsi obtenu un modèle de saut de température où le coefficient du saut dépend des coefficients d'accommodation de la quantité de mouvement tangentielle et du coefficient d'accommodation de la quantité de mouvement normale ; le coefficient d'accommodation de l'énergie proprement dit est en général dépendant de ces deux derniers coefficients et de la distribution des particules incidentes.

Il est à noter aussi que le besoin d'une correction pour le coefficient classique  $\left(\frac{2-\sigma_T}{\sigma_T}\right)$  à souvent été évoquée dans la littérature. Par exemple *Welander* obtient une expression du saut de température prenant en compte l'effet de la couche de Knudsen : à la place de ce coefficient, il trouve  $\left(\frac{2-K\sigma_T}{\sigma_T}\right)$  où  $K$  est une constante calculée numériquement et égale à 0.827. Dans la relation (4.13) la correction apportée au coefficient classique du saut de température est d'une nature tout à fait différente ; elle réside simplement dans le jeu des coefficients d'accommodations des composantes de la quantité de mouvement, et provient de la description de l'interaction des particules avec la paroi, comme le suggère la discussion développée par *Shen* dans la référence [81].

### Expression du saut sur une surface isotrope

Dans le cas d'une surface isotrope, le processus d'interaction des particules avec la paroi est invariant par rotation autour de tout axe normal à la paroi. Ainsi les accommodations des composantes de la quantité de mouvement des particules, dans le plan tangent à la paroi sont équivalentes : ce qui implique plus précisément l'égalité  $\alpha_y = \alpha_z$ . Le saut de température s'écrit alors, en négligeant une fois encore le terme en  $\frac{U_y^2}{C_0^2}$ ,

$$(T_0 - T_w) = \frac{\lambda_c \sqrt{\pi}}{nkC_0} \left( \frac{2 - \frac{3\alpha_x + 2\alpha_y}{5}}{\alpha_x + \alpha_y} \right) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\mu}{nk} \left( \frac{3\alpha_x}{\alpha_x + \alpha_y} - \frac{2T_w}{3T_0} \right) \frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{\mu T_w}{3nkT_0} \left( \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z} \right) \quad (4.15)$$

#### 4.1.4 Analyse dimensionnelle dans des configurations particulières

Dans cette partie, on analyse brièvement en utilisant un adimensionnement adéquat, l'importance des différents termes figurant dans l'expression du saut de température pour quelques configurations particulières. Dans toute cette partie on suppose la paroi isotrope et on n'utilise donc que des relations de saut où ne figure qu'un seul coefficient d'accommodation tangentiel :  $\alpha_y = \alpha_z$ .

## Écoulement normal à une paroi

On considère un écoulement unidimensionnel normal à une surface schématisé sur la figure (4.1); dans cette configuration le saut de température à la paroi ne contient que

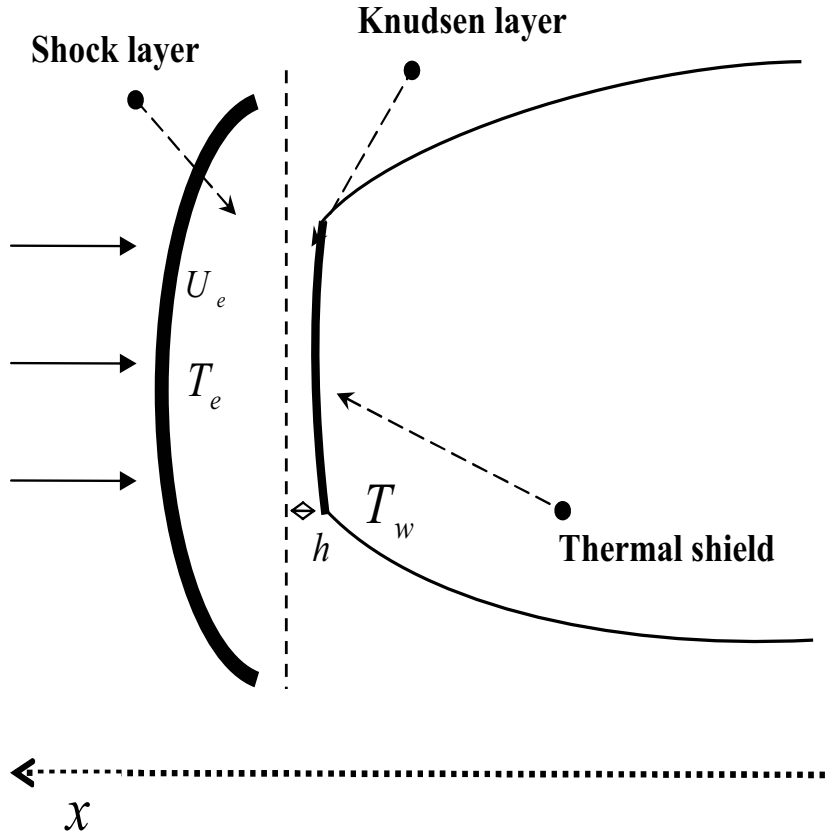


Fig. 4.1: Écoulement normal à une paroi : configuration type d'écoulement devant un engin spatial

deux termes et s'écrit

$$(T_0 - T_w) = \frac{\lambda_c \sqrt{\pi}}{nkC_0} \left( \frac{2 - \frac{3\alpha_x + 2\alpha_y}{5}}{\alpha_x + \alpha_y} \right) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\mu}{nk} \left( \frac{3\alpha_x}{\alpha_x + \alpha_y} - \frac{2T_w}{3T_0} \right) \frac{\partial U_x}{\partial x}$$

On utilise les variables adimensionnelles suivantes

$$T^* = \frac{T}{T_w}, \quad U_x^* = \frac{U_x}{U_e}, \quad x^* = \frac{x}{h}$$

où  $U_e$  et  $T_e$  sont respectivement une vitesse et une température constantes caractérisant l'écoulement hors de la couche de Knudsen et où  $h$  est l'épaisseur caractéristique de la couche de Knudsen ; on note

$$K_T = \frac{2 - \frac{\sigma_1}{5}}{\frac{\sigma_0}{2}}, \quad K_x = \frac{3\alpha_x}{\sigma_0}.$$

La relation de saut de température adimensionnée s'écrit alors

$$\frac{T_0 - T_w}{T_w} = \frac{\lambda_c}{nkh} \sqrt{\frac{\pi m}{2kT_0}} \left( \frac{K_T}{2} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} - \frac{k\mu}{m\lambda_m} U_e \sqrt{\frac{2m}{\pi kT_0}} \left( K_x \frac{T_0}{T_w} - \frac{2}{3} \right) \frac{\partial U_x^*}{\partial x^*} \right).$$



En utilisant maintenant la relation de Chapman entre la conductivité thermique et la viscosité,  $\frac{k\mu}{m\lambda_c} = \frac{4}{15}$ , qui ne nécessite aucun choix particulier de potentiel d'interaction entre les particules [21, 18], et la définition courante du libre parcours moyen  $\lambda_m = \frac{\mu}{mn} \sqrt{\frac{\pi m}{2kT_0}}$ , on met la relation de saut de température adimensionnée sous la forme

$$T_0^* - 1 = K_n \left( K_T \frac{15}{8} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} - \sqrt{\frac{6}{\pi}} \Re \left( K_x T_0^* - \frac{2}{3} \right) \frac{\partial U_x^*}{\partial x^*} \right) \quad (4.16)$$

où  $K_n$  est le nombre de Knudsen,  $K_n = \frac{\lambda_m}{h}$ , et où le nouveau nombre sans dimension  $\Re$ , défini par

$$\Re^2 = \frac{\frac{1}{2} m U_e^2}{\frac{3}{2} k T_0}, \quad (4.17)$$

évalue le rapport de l'énergie mécanique à l'énergie d'agitation thermique et peut s'écrire aussi avec le nombre de Mach de l'écoulement extérieur,  $\Re = \frac{\sqrt{5}}{3} Ma_e \sqrt{\frac{T_e}{T_0}}$ .

La configuration d'écoulement unidimensionnel normal à la paroi est une configuration type propice à la modélisation des conditions aux limites dans les écoulements stationnaires au nez des boucliers thermiques d'engin spatiaux. Dans ces types d'écoulements le nombre de Mach pris juste en dehors de la couche de Knudsen devant le bouclier thermique, est souvent légèrement inférieur à 1, tandis que le rapport  $\sqrt{\frac{T_e}{T_0}}$  ne dépasse pas 4 ou 5. Il en résulte donc que le nombre  $\Re$  est globalement de l'ordre de 1.

D'autre part pour comparer l'ordre de grandeur des gradients, on introduit maintenant les variables adimensionnées suivantes

$$\theta = \frac{T - T_w}{T_i - T_w}, \quad \omega = \frac{U_x}{U_i},$$

où l'indice  $i$  caractérise ici l'état du gaz à l'entrée de la couche de Knudsen. Ainsi

$$\frac{\partial T^*}{\partial x^*} = \frac{T_i - T_w}{T_w} \frac{\partial \theta}{\partial x^*}, \quad \frac{\partial U_x^*}{\partial x^*} = \frac{U_i}{U_e} \frac{\partial \omega}{\partial x^*}, \quad (4.18)$$

les gradients  $\frac{\partial \theta}{\partial x^*}$  et  $\frac{\partial \omega}{\partial x^*}$  sont de l'ordre de l'unité, alors que le rapport  $\frac{U_i}{U_e}$  reflète le rapport d'échelle spatiale entre la dimension de la couche de Knudsen et la longueur caractéristique de l'écoulement extérieur : autrement dit ce rapport est de l'ordre du nombre de Knudsen de l'écoulement extérieur, loin de la paroi. Il apparaît donc à travers (4.16) et (4.18) que l'apport du terme de gradient de vitesse au saut de température à la paroi dépend de l'ordre de grandeur du saut de température lui-même. Si le saut de température est de l'ordre de la température de la paroi alors la contribution du terme de gradient de vitesse est négligeable. En revanche, pour de faibles sauts de température, l'échauffement visqueux aura une influence significative sur le saut de température, à travers le terme en gradient de vitesse de la relation (4.16).

### Configuration de type couche limite ou microfluidique

Dans cette partie, on considère des configurations d'écoulements bidimensionnels, de type couche limite ou écoulement microfluidique, représentées sur les deux figures 4.2. On définit les quantités adimensionnelles suivantes

$$T^* = \frac{T}{T_w}, \quad U_x^* = \frac{U_x}{V_n}, \quad U_y^* = \frac{U_y}{U_s}, \quad y^* = \frac{y}{L}, \quad x^* = \frac{x}{h}$$

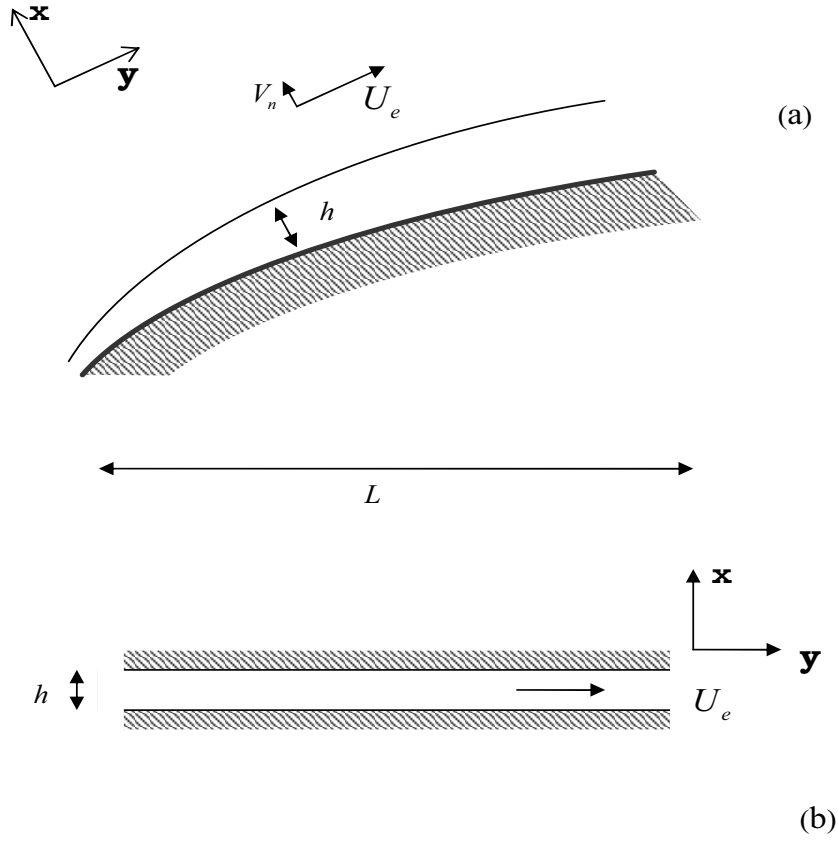


Fig. 4.2: configuration de type couche limite ou microcanaux

où  $L$  est la longueur caractéristique de la paroi, et  $h$  l'épaisseur de la couche limite où le diamètre du canal.  $U_e$  et  $V_n$  représentent respectivement la vitesse caractéristique tangentielle et la vitesse caractéristique normale.  $U_s$  est une vitesse de glissement caractéristique à la paroi. On note,  $K_y = \frac{\alpha_y - \alpha_z}{2\sigma_0}$ ,  $\epsilon_n = \frac{V_n}{U_e}$ ,  $\epsilon_h = \frac{h}{L}$ ,  $\eta^0 = \frac{U_s}{U_e}$ ; en introduisant ces différentes quantités dans le saut de température (4.1.3) on obtient

$$T_0^* - 1 = K_n \left\{ K_T \frac{15}{8} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} - \sqrt{\frac{6}{\pi}} \Re \left[ \left( K_x T_0^* - \frac{2}{3} \right) \epsilon_n \frac{\partial U_x^*}{\partial x^*} - \left( K_y T_0^* + \frac{1}{3} \right) \eta^0 \epsilon_h \frac{\partial U_y^*}{\partial y^*} \right] \right\}. \quad (4.19)$$

où  $\Re$  est le nombre sans dimension précédemment défini dans la configuration de l'écoulement normal à la paroi.

Dans le cadre des deux configurations de la figure (4.2), il est clair que  $\frac{h}{L} \approx \frac{V_n}{U_e} \ll 1$ . D'autre part on a  $\frac{U_s}{U_e} < 1$  et  $\eta^0 \epsilon_h < \epsilon_n \ll 1$ ; et dans la relation (4.19), les variables adimensionnées (les quantités étoilées) sont de l'ordre de 1. Dans une couche limite classique le nombre  $\Re$  est du même ordre que dans le cas analysé précédemment, soit  $\Re \approx 1$ . Mais dans un écoulement de microfluidique, le nombre de Mach est généralement petit devant 1 ( $\approx 0.1 - 0.2$ ), et le rapport  $\frac{T_0}{T_e}$  reste de l'ordre de 1 [13]. Par conséquent  $\Re$  n'excède pas 0.1 et le poids relatif des termes visqueux sur le saut de température est alors moins important que dans le cas du paragraphe précédent; ces effets peuvent donc être négligés dans les écoulements microfluidiques ordinaires.

Dans une configuration simple d'écoulement tangent à une paroi, un seul gradient tangentiel  $y$  est conservé dans les relations (4.14) et (4.15). Alors les termes d'échauffement visqueux à la paroi ne proviennent que de l'accélération du fluide le long de la paroi.

Malgré sa simplicité théorique, ce cas ne paraît pas très réaliste le long d'une surface isotrope : en effet, une telle configuration théorique d'écoulement unidimensionnel ne paraît vraisemblable que dans le cas d'écoulement où les effets de compressibilité sont négligeables (par exemple en écoulement de Poiseuille), mais alors  $\nabla \cdot U$  est égal à zéro dès le départ et tous les gradients de vitesse disparaissent. Par contre la situation paraît différente si la nature de la paroi se traduit par la présence de termes d'anisotropies en  $\alpha_y$  et  $\alpha_z$  dans les relations (4.14) et (4.19) ; dans ce cas on peut avoir des écoulements unidirectionnels avec des effets d'échauffement visqueux même lorsque les effets de compressibilité sont négligeables.

## 4.2 Vitesse macroscopique du fluide au contact de la paroi

On aborde dans cette partie le calcul de la vitesse de glissement du fluide au contact de la paroi. Pour évaluer le saut de température, on avait calculé le flux de chaleur au contact de la paroi et effectué un bilan de flux de chaleur. Dans cette partie, concernant la vitesse macroscopique, on a recours à un bilan de flux de masse ; mais ici ce bilan se réduit au calcul de la vitesse macroscopique à la paroi à partir de sa définition donnée par la théorie cinétique. On obtient ainsi

$$-nU = \int_{\Omega'} \xi' f^- d\xi' + \int_{\Omega} \xi f^+ d\xi . \quad (4.20)$$

Le premier signe ( $-$ ), dans cette définition (4.20), vient du fait que la moyenne de la vitesse des particules donnée par la fonction de distribution au contact de la paroi  $x = 0$ , est égale à la vitesse macroscopique de la paroi par rapport au gaz et non à la vitesse macroscopique du gaz par rapport à la paroi comme c'est le cas en tout point situé à l'intérieur du volume [51].

Projetons d'abord la relation (4.20) sur l'axe des  $x$  : en utilisant la relation liant  $f^+$  à  $f^-$ , puis la condition de normalisation, on trouve  $U_x = 0$ , ce qui est conforme à la condition d'imperméabilité de la paroi.

### 4.2.1 Calcul de la vitesse de glissement

Projetons maintenant la relation (4.20) sur l'axe des  $y$ . En utilisant la relation liant  $f^+$  à  $f^-$ , on obtient en  $x = 0$ ,

$$nU_y = \int_{\Omega'} \xi'_x \left[ \int_{\Omega} \frac{\xi_y}{\xi_x} \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi \right] f^- d\xi' - \int_{\Omega'} \xi'_y f^- d\xi' .$$

L'intégrale  $\int_{\Omega} \frac{\xi_y}{\xi_x} \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi$  est calculée dans les Annexes à partir de l'opérateur  $\mathcal{B}(\xi', \xi)$  donné au chapitre 2 ; ce calcul donne

$$\int_{\Omega} \frac{\xi_y}{\xi_x} \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi = \alpha_x (1 - \alpha_y) \frac{\sqrt{\pi}}{C_w} \xi'_y - (1 - \alpha_x) (1 - \alpha_y) \frac{\xi'_y}{\xi'_x} .$$

Il vient,

$$nU_y = \alpha_x (1 - \alpha_y) \frac{\sqrt{\pi}}{C_w} \int_{\Omega'} \xi'_x \xi'_y f^- d\xi' - [1 + (1 - \alpha_x) (1 - \alpha_y)] \int_{\Omega'} \xi'_y f^- d\xi' . \quad (4.21)$$

Pour la suite, il nécessite une forme de distribution des particules incidentes. On considère la même distribution de particules incidentes que celle utilisée pour le flux chaleur, à

savoir celle donnée par la relation (4.6). Utilisant le changement de variable  $\xi' = V' + U$ , on décompose cette relation (4.21) sous la forme

$$nU_y = \alpha_x(1 - \alpha_y) \frac{\sqrt{\pi}}{C_w} [U_y J_{0x} + U_y J_2 + J_4] - \quad (4.22)$$

$$(1 + (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y)) [U_y J_0 + U_y J_1 + J_3] ,$$

où sont notées les intégrales suivantes :

$$J_0 = \int_{\Omega'} F_0 dV' \quad J_{0x} = \int_{\Omega'} V'_x F_0 dV'$$

$$J_1 = \int_{\Omega'} \varphi F_0 dV' \quad J_2 = \int_{\Omega'} V'_x \varphi F_0 dV'$$

$$J_3 = \int_{\Omega'} V'_y \varphi F_0 dV' \quad J_4 = \int_{\Omega'} V'_x V'_y \varphi F_0 dV' .$$

$J_0$  et  $J_{0x}$  sont facilement évaluées : on obtient  $J_0 = \frac{n}{2}$  et  $J_{0x} = -\frac{nC_0}{2\sqrt{\pi}}$ . La relation (4.22) peut s'écrire alors

$$U_y(4 - \gamma + \beta \frac{C_0}{C_w}) - \beta \frac{U_y}{C_0} \frac{2C_0\sqrt{\pi}}{nC_w} J_2 + (2 - \gamma) \frac{U_y}{C_0} \frac{2C_0}{n} J_1 = \quad (4.23)$$

$$-(2 - \gamma) \frac{2}{n} J_3 + \beta \frac{2\sqrt{\pi}}{nC_w} J_4 ,$$

où

$$\beta = \alpha_x(1 - \alpha_y), \quad \gamma = \alpha_y + \alpha_x(1 - \alpha_y)$$

Les calculs de  $J_1$ ,  $J_2$ ,  $J_3$ , et  $J_4$  développés à partir de l'expression (4.7) de  $\varphi(V')$  donnent

$$J_1 = -\frac{3}{4} \frac{\mu}{mT_0 C_0 \sqrt{\pi}} \frac{\partial T}{\partial x} \quad J_2 = -\frac{\mu}{mC_0 \sqrt{\pi}} \left( \frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{1}{3} \nabla \cdot U \right) \quad (4.24)$$

$$J_3 = -\frac{\mu}{mC_0 \sqrt{\pi}} \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right) \quad J_4 = \frac{3}{8} \frac{\mu C_0}{mT_0 \sqrt{\pi}} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\mu}{2m} \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right) .$$

Finalement, portant les expressions (4.24) dans (4.23), on obtient

$$U_y(4 - \gamma + \beta \sqrt{\frac{T_0}{T_w}}) + \beta \frac{U_y}{C_0^2} \frac{2\mu}{mn} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}} \left( \frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{1}{3} \nabla \cdot U \right) - \quad (4.25)$$

$$(2 - \gamma) \frac{U_y}{C_0} \frac{3\mu}{2mnT_0 \sqrt{\pi}} \frac{\partial T}{\partial x} =$$

$$\frac{2\mu}{mnC_0 \sqrt{\pi}} (2 - \gamma + \beta \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}}) \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right) + \beta \frac{3\mu}{4mnT_0} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}} \frac{\partial T}{\partial y} .$$

La relation (4.25) ainsi écrite, est la condition aux limites sur la vitesse, obtenue par un calcul direct, partant de la définition d'une vitesse moyenne. Cette relation (4.25), comme on peut le voir, ne porte que sur la composante  $y$ ; la relation sur la deuxième composante en  $z$  s'écrit de la même façon en remplaçant  $y$  par  $z$ .

Comme pour le flux de chaleur, la première critique que l'on peut faire à l'égard de cette relation concerne l'utilisation d'une distribution de Chapman pour représenter les particules incidentes. Comme on l'a vu, ce choix signifie que l'on néglige l'effet des collisions sur la distribution des particules réfléchies car nous privilégions ici l'effet de l'interaction des

particules avec la paroi. En dépit de cette approximation, cette relation présente un intérêt particulier lié au caractère systématique de la démarche suivie pour obtenir la vitesse de glissement.

On aurait pu établir une expression de vitesse glissement dans l'esprit des démarches classiques : au lieu de calculer la vitesse à partir de la définition (4.20), on exprime le flux de quantité de mouvement à l'aide des fonctions de distribution incidente et réfléchie, ce qui nous donne une première expression de la contrainte à la paroi ; ensuite, on identifie l'expression trouvée avec la forme de la contrainte tirée de la loi de Newton,  $\frac{1}{2}\mu(\frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x})$ . Le résultat obtenu serait alors différent de la relation que nous venons d'établir notamment par le rôle joué par les coefficients d'accommodation. Mais, comme on l'a déjà évoqué dans l'introduction de ce chapitre une telle démarche serait tributaire de l'utilisation d'une contrainte donnée par la loi de Newton qui indirectement impose certaines restrictions au glissement de vitesse et semble mal adaptée au concept de longueur de glissement sur lequel on reviendra au chapitre suivant.

#### 4.2.2 Forme simplifiée de la vitesse de glissement

Dans la condition aux limites sur la vitesse donnée par la relation (4.25), on peut voir qu'il existe un rapport  $\frac{U_y}{C_0}$  entre les termes figurant dans le membre de droite et les termes qui leur correspondent, c'est à dire qui ont la même structure, dans le membre de gauche. Sur la base des arguments utilisés pour le saut de température (vitesse de glissement au contact de la paroi négligeable devant la vitesse d'agitation thermique, i.e., en  $x = 0, U_y^2 \ll C_0^2$ ), les deux termes incluant le facteur  $\frac{U_y}{C_0}$  peuvent être négligés devant les termes correspondant à gauche. L'évaluation des ordres de grandeurs confirme ces approximations avec quelques réserves lorsqu'il existe un fort gradient de température normal à la paroi. La vitesse de glissement s'écrit alors pour la composante  $y$ ,

$$(4 - \gamma + \beta \sqrt{\frac{T_0}{T_w}})U_y = \quad (4.26)$$

$$\frac{2\mu}{mnC_0\sqrt{\pi}}(2 - \gamma + \beta \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}})(\frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x}) + \beta \frac{3\mu}{4mnT_0} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}} \frac{\partial T}{\partial y} .$$

Étant donné que la composante  $z$  et la composante  $y$  jouent des rôles parfaitement symétriques, la deuxième composante de la vitesse de glissement s'écrit de la même façon en remplaçant  $y$  par  $z$ , à savoir

$$(4 - \gamma + \beta \sqrt{\frac{T_0}{T_w}})U_z = \quad (4.27)$$

$$\frac{2\mu}{mnC_0\sqrt{\pi}}(2 - \gamma + \beta \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}})(\frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x}) + \beta \frac{3\mu}{4mnT_0} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}} \frac{\partial T}{\partial z} .$$

Cette forme (4.26)-(4.27), est beaucoup plus proche de la forme classique de la vitesse de glissement que ne l'est l'expression complète (4.25) ; on y retrouve au second membre la présence des termes classiques. D'une part, on note la somme des deux gradients croisés de la vitesse qui rappelle l'écriture classique de la contrainte induisant le glissement en absence de gradient thermique. Même si la première expression de la vitesse de glissement proposée par Maxwell, qui est une expression unidimensionnelle, n'inclut pas formellement le deuxième gradient  $\frac{\partial U_y}{\partial x}$  [51, 32], ce deuxième gradient a une contribution non négligeable dans les configurations géométriques à forte courbure comme par exemple dans les écoulements de type Couette cylindrique [32]. D'autre part, on trouve un deuxième

terme où figure le gradient de température et qui représente le phénomène de thermal creep. On note enfin que les coefficients portés par ces termes dépendent du saut de température et des divers coefficients d'accommodation.

Dans les conditions où la paroi est considérée comme isotrope ( $\alpha_y = \alpha_z$ ), alors les coefficients  $\gamma$  et  $\beta$  sont les mêmes dans les deux relations donnant les composantes en  $y$  et  $z$  de la vitesse de glissement. Dans ce cas les deux relations de glissement sur  $U_y$  et  $U_z$  traduisent une même relation vectorielle dans le plan tangent; ce qui montre que l'expression de la vitesse de glissement déduite ici est bien adaptée à une configuration d'écoulement tridimensionnel.

### 4.2.3 Vitesse de glissement sur une surface spéculaire

Dans les situations correspondant à une surface de réflexion parfaitement spéculaire ( $\alpha_x = \alpha_y = \alpha_z = 0$ ), deux enseignements peuvent être tirés de la relation de glissement (4.26), qu'on ne peut pas obtenir à partir des expressions classiques de la vitesse de glissement.

Premièrement, lorsque l'on pose que tous les coefficients d'accommodation sont nuls dans l'expression (4.26), le terme de "thermal creep" s'annule. On peut noter que ce résultat corrobore l'explication du phénomène du thermal creep donnée par Maxwell et Reynold [68, ?], puisque ces auteurs considèrent ce phénomène comme résultant des échanges entre les particules et la paroi. L'apparition d'une vitesse macroscopique, liée à l'action d'un gradient thermique tangentiel à la paroi (le thermal creep), ne doit à priori plus se produire dans le cas où les conditions aux limites cinétiques deviennent purement géométriques n'exprimant plus d'échange d'énergie ou de quantité de mouvement (donc aucune contrainte exercée), comme dans le cas d'une réflexion purement spéculaire.

Le deuxième enseignement est que, dans le cas d'une réflexion spéculaire, l'expression (4.26) donne une réponse qualitativement correcte de la vitesse de glissement, de la forme

$$U_y = \frac{\mu}{mnC_0\sqrt{\pi}} \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right) \simeq \frac{\lambda_m}{\mu} \tau \quad (4.28)$$

où  $\tau$  est la composante tangentielle de la contrainte exercée à la paroi. Ce résultat exprime en fait que sur une surface spéculaire, la vitesse qu'on aurait au contact de la paroi est la vitesse qu'on mesure à une distance égale au libre parcours moyen de la paroi, ce qui correspond à un résultat phénoménologique très ancien [20, 21]. Par contre l'expression de Maxwell conduit plutôt à une sorte d'indétermination de la vitesse de glissement pour cette situation spéculaire.

### 4.2.4 Analyse dimensionnelle de la vitesse de glissement

On considère les configurations d'écoulement de la figure 4.2, et on analyse la relation (4.26) de la même façon que, dans le cas de la température, on analyse (4.13) pour obtenir la relation (4.19). On définit en plus des paramètres d'adimensionnement de la section 4.1.4, le paramètre  $\eta_y = \frac{U_y}{U_e}$ . On obtient alors pour la vitesse adimensionnée

$$(4 - \gamma + \beta\sqrt{T_0^*})\eta_y = \frac{3}{2}K_n(2 - \gamma + \beta\frac{\pi}{2}\sqrt{T_0^*})(\eta^0 \frac{\partial U_y^*}{\partial x^*} + \epsilon_h\epsilon_n \frac{\partial U_x^*}{\partial y^*}) + \beta\epsilon_h \frac{\sqrt{6\pi}}{8\Re} \frac{\partial T^*}{\partial y^*} \quad (4.29)$$

Une fois encore, les quantités étoilées, sont ici de l'ordre de l'unité. Le paramètre  $\eta^0$  est habituellement compris entre 0.1 et 0.2. Par conséquent en suivant les mêmes analyses que dans les adimensionnements précédents, on constate que l'effet de thermal creep est

pondéré par un facteur  $(\frac{\epsilon_n}{\mathfrak{R}})$ , de même poids que le coefficient  $\eta^0 K_n$  du gradient normal de vitesse. On retrouve aussi le caractère généralement négligeable du deuxième gradient de vitesse (le gradient tangentiel de la composante normal). Néanmoins, l'estimation des ordres de grandeur faite ici n'est valable que pour des géométries planes simples. Les géométries plus compliquées avec présence de forte courbure, ou encore le mouvement propre de la paroi, rendraient sans doute nécessaire la présence du deuxième gradient dans l'expression de la vitesse de glissement [32]

## 4.3 Correction de la couche de Knudsen sur les relations de discontinuité

L'utilisation de la distribution de Chapman Enskog comme distribution des particules heurtant la paroi revient à négliger les effets des collisions gaz/gaz, sur les particules incidentes dans la couche de Knudsen. D'après les calculs de certains auteurs [6], cette approximation entraînerait une erreur de l'ordre de 15% sur les relations de saut ainsi établies. Néanmoins, ces relations de discontinuités peuvent être revues a posteriori, pour tenir compte de ces effets collisionnels entre particules dans la couche de Knudsen, au moyen de certaines des propriétés de cette couche. On expose ci-dessous le principe d'une telle correction pour le saut de température.

### 4.3.1 Couche de Knudsen comme une zone de très forts gradients

Admettons comme chez Welander que la couche de Knudsen soit avant tout une zone de variation significative des gradients au travers d'une couche de faible épaisseur. Dans les calculs précédents, par exemple dans le calcul du saut de température exposé à la section 4.1.1, il convient alors de distinguer les gradients à l'entrée de la couche des gradients au contact de la paroi, contrairement à la confusion faite précédemment entre les gradients en  $x = 0$  et les gradients à l'entrée de la couche. On posera donc, par exemple pour le gradient de température,

$$\frac{\partial T}{\partial x}|_0 = k_e \frac{\partial T}{\partial x}|_{KL} \quad (4.30)$$

où l'indice  $KL$  renvoie à l'entrée de la couche de Knudsen et l'indice  $0$  au point de contact avec la paroi en se plaçant à l'échelle de la couche de Knudsen. Le nombre  $k_e$ , est une constante permettant d'évaluer la variation du gradient à la traversée de la couche Knudsen.

Dans les relations du flux de chaleur (4.10), les gradients sont ceux au contact de la paroi (i.e qu'ils portent en réalité l'indice  $0$ ), tandis que dans l'expression du flux de chaleur à l'aide de la loi de Fourier (4.2), le gradient de température est un gradient pris à l'entrée de la couche de Knudsen puisqu'il représente le flux de chaleur à l'entrée de cette dernière. Dans tous les résultats de sauts de température précédemment établis, les gradients que l'on doit exprimer au contact de la paroi sont ceux qui proviennent de l'expression du flux de chaleur calculé au contact de cette paroi. Dans les expressions de sauts de température de la section 4.1.1, on peut remplacer alors ces gradients "au contact de la paroi" au profit des gradients à l'entrée de la couche par la relation (4.30). On trouve ainsi une expression du saut de température, tenant compte de l'effet de la couche de Knudsen, de la forme

$$(T_0 - T_w) = \frac{\lambda_c \sqrt{\pi}}{nkC_0} \left( \frac{2 - k_e \frac{\sigma_1}{5}}{\sigma_0} \right) \frac{\partial T}{\partial x} |_{KL} + \dots \quad (4.31)$$

La relation (4.31) est encore une relation de saut dans laquelle on utilise l'approximation de Navier Stokes pour la distribution incidente mais dans laquelle on a tenu compte de la variation du gradient à travers la couche de Knudsen. Sur le plan pratique, dans l'expression (4.31), le gradient  $\frac{\partial T}{\partial x} |_{KL}$  est à lire comme le gradient à l'échelle macroscopique et donc, mesuré à cette échelle, comme un gradient à la paroi : c'est à dire comme le gradient mesuré en limite du continuum.

Le type de correction (4.31) du saut de température par un coefficient correcteur sur le gradient, est le type de correction qu'ont obtenu Welander ou encore Larini [72, 2], dans le cadre d'une autre forme d'analyse (résolution de l'équation de Boltzmann à travers la



couche de Knudsen par un modèle B.G.K.) L'évaluation de  $k_e$  selon le calcul numérique de Welander donne la valeur 0.827. Mais le coefficient  $k_e$  donné par une démarche basée sur (4.30) pourrait varier sensiblement selon les conditions physiques respectives du gaz et de la paroi.

### 4.3.2 Les relations de saut de second ordre

Pour établir les relations de sauts précédentes, on a utilisé une approximation d'ordre 1 de la fonction de distribution. L'utilisation d'une approximation d'ordre plus élevé (par exemple l'approximation d'ordre 2 conduisant aux équations de Burnett) comme distribution des particules incidentes, donnerait évidemment des relations de sauts d'ordre plus élevé. En toute logique, de telles relations d'ordre 2 ne seraient réellement cohérentes qu'avec une équation macroscopique de fluide d'ordre 2, comme les équations de Burnett elles mêmes appliquées à l'écoulement extérieur.

## 4.4 Saut de températures dans un gaz polyatomique

La présence des modes internes en polyatomique alourdit la construction des modèles cinétiques. Ces constructions demandent au préalable deux types de distinctions : d'une part il faut distinguer s'il y a un seul mode interne ou s'il y en a plusieurs ; et d'autre part si les modes internes en présence ont des temps de relaxation du même ordre ou des temps de relaxation d'ordres différents, vers l'état d'équilibre local avec le mode de translation. L'expression de la distribution d'équilibre local, ou encore de la solution d'ordre zéro de l'équation de Boltzmann pour un gaz polyatomique, sera différente suivant ces différents cas. Ainsi la forme de distribution dépendra en partie de la hiérarchie des différents types de relaxation liés aux différents types d'échanges d'énergies intervenant dans les processus collisionnels. Évidemment cette hiérarchie des différents temps caractéristiques repose sur l'observation expérimentale des gaz hors d'équilibre (notamment à l'aval des ondes de chocs)

### 4.4.1 Paramètres généraux des modèles cinétiques pour gaz polyatomiques

D'une manière générale, on peut définir les énergies moyennes macroscopiques d'ordre zéro des particules associées à chaque mode interne. Elles s'écrivent à l'aide de la distribution d'équilibre local sous la forme

$$n(kT_r)\varepsilon_r = nE_r(T_r) = \sum_{ir,iv} \int E_{ir} F_i(\xi, E_{ir}, E_{iv}) d\xi, \quad (4.32)$$

$$n(kT_v)\varepsilon_v = nE_v(T_v) = \sum_{ir,iv} \int E_{iv} F_i(\xi, E_{ir}, E_{iv}) d\xi. \quad (4.33)$$

Dans le cas où les distributions des énergies internes d'ordre zéro sont données par des distributions Boltzmanniennes, ces énergies moyennes d'ordre zéro s'expriment par

$$E_r(T_r) = \sum_{ir} \frac{g_{ir} E_{ir} e^{-\frac{E_{ir}}{kT_r}}}{Q_r(T_r)}, \quad (4.34)$$

$$E_v(T_v) = \sum_{iv} \frac{E_{iv} e^{-\frac{E_{iv}}{kT_v}}}{Q_v(T_v)} \quad (4.35)$$

où les poids (ou fonctions de partition) des modes internes s'écrivent

$$Q_r(T_r) = \sum_{ir} g_{ir} e^{-\frac{E_{ir}}{kT_r}}, \quad Q_v(T_v) = \sum_{iv} e^{-\frac{E_{iv}}{kT_v}} \quad (4.36)$$

et où  $T_r$  est la température moyenne de rotation (d'ordre zéro égale à la température de translation dans les applications envisagées à l'équilibre) et  $T_v$  la température de vibration d'ordre zéro. On retrouve notamment ces situations d'une distribution Boltzmannienne des énergies internes dans le cas où le mode interne est en équilibre avec la translation ; et pour l'énergie de vibration, c'est aussi le cas lorsque le modèle de vibration est celui de l'oscillateur harmonique. Dans la suite, nous ne considérons que ces modèles où les énergies internes suivent des distributions Boltzmanniennes. De plus, on décrit la structure rotationnelle des molécules comme un rotateur sphérique (négligeant le couplage vibration/rotation) et l'on considère les niveaux de rotation comme une suite continue. Alors

l'énergie moyenne de rotation d'ordre zéro est donnée par l'expression classique que nous adopterons,

$$E_r(T_r) = kT_r . \quad (4.37)$$

On notera enfin qu'en toute rigueur, dans le cadre d'une approche Enskogienne, seule la température d'équilibre local, relative à l'ensemble des modes, est la même à tous les ordres d'approximation. Toutefois, pour ne pas compliquer les notations, les températures d'ordre zéro de chaque mode seront notées ici  $T_t$ ,  $T_r$ ,  $T_v$ .

Les flux d'énergies de translation  $Q_{tra}$ , de rotation  $Q_{rot}$ , et de vibration  $Q_{vib}$ , associés aux différents modes, s'expriment à la paroi à partir des distributions des particules incidentes et réfléchies,

$$\begin{aligned} Q_{tra} &= \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} \frac{1}{2} m |V_x'| V'^2 f_i^- d\xi' - \sum_{ir,iv} \int_{\Omega} \frac{1}{2} m |V_x| V^2 f_i^+ d\xi \\ Q_{rot} &= \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} |V_x'| E_{ir'} f_i^- d\xi' - \sum_{ir,iv} \int_{\Omega} |V_x| E_{ir} f_i^+ d\xi \\ Q_{vib} &= \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} |V_x'| E_{iv'} f_i^- d\xi' - \sum_{ir,iv} \int_{\Omega} |V_x| E_{iv} f_i^+ d\xi \end{aligned} \quad (4.38)$$

On peut donc calculer ces différents flux à la paroi à partir d'une expression de la fonction de distribution incidente, c'est à dire d'un choix de modèle cinétique. Le choix est ici plus complexe que dans le cas monoatomique où la fonction incidente était décrite par le modèle de Chapman. Pour l'établissement des relations de sauts, on peut distinguer alors différents cas du point de vue de la structure interne et de l'état d'équilibre des molécules.

#### 4.4.2 Cas où un seul mode interne est excité

On considère ici que le seul mode interne excité est la rotation. Les températures sont donc supposées modérées et l'énergie de vibration négligeable. De plus, on suppose que le mode de rotation est en équilibre avec la translation. On donnera en suite au paragraphe suivant, un aperçu des relations de sauts pour d'autres configurations, notamment pour le cas d'un mode interne hors d'équilibre.

Le modèle cinétique que l'on utilise ici pour la distribution des particules incidentes découle d'un développement de *Morse* [85]. Ce dernier a appliqué une technique de développement dite des échelles multiples, dans une approche où l'intégrale de collision de l'équation de Boltzmann est modélisée par une version du modèle B.G.K., adaptée au cas des gaz polyatomiques (B.G.K.M.). La méthode des échelles multiples, choisie par Morse, paraît a priori bien adaptée à cette description polyatomique où diverses échelles de temps sont naturellement présentes à travers les divers phénomènes de relaxation (et les divers temps de relaxation).

Comme on le sait, si l'on s'en tient à l'équation cinétique-modèle à partir de laquelle Morse a explicité son calcul, la viscosité et la conductivité thermique du mode de translation qui s'y rapportent, ne sont pas reliées par le bon nombre de Prandtl. Mais on peut relativiser largement cet inconvénient si l'on observe qu'en appliquant la méthode de Morse (i.e. le développement multi-échelle), non pas à une équation-modèle de type BGK, mais à l'équation de Boltzmann en suivant la démarche de Chapman, on obtient une solution formellement semblable à celle dérivant de BGKM, mais dans laquelle viscosité et conductivité seraient liées par le bon nombre de Prandtl.

La distribution d'ordre zéro de la solution de l'équation de Boltzmann s'écrit ici

$$F_i(\xi, E_{ir}) = \frac{n}{(C\sqrt{\pi})^3} e^{-\frac{V^2}{C^2}} \frac{g_{ir} e^{-\frac{E_{ir}}{kT_t}}}{Q_r(T_t)} . \quad (4.39)$$

où  $T_t$  est la température moyenne de l'ensemble translation-rotation, définie par

$$C_v T_t = \frac{1}{n} \sum_{ir} \int \frac{mV^2}{2} f_i d\xi + \frac{1}{n} \sum_{ir} \int E_{ir} f_i d\xi . \quad (4.40)$$

L'expression de la fonction de distribution d'ordre 1 s'écrit alors

$$f_i^- = F_i [1 + \varphi_t(V') - \varphi_r(E_{ir'})] \quad (4.41)$$

où  $\varphi_t(V')$  est la partie de la perturbation (par rapport à la Boltzmannienne), qui est associée au mode de translation et qui est donnée par

$$\varphi_t(V') = \frac{m}{kT_t} \left[ \frac{\lambda_t}{nkT_t} \nabla T_t \cdot V' \left( 1 - \frac{2}{5C^2} V'^2 \right) + \frac{\mu}{nkT_t} (V'_i V'_j - \frac{1}{3} V'^2 \mathbb{I}) : \frac{\partial U_i}{\partial X_j} \right] . \quad (4.42)$$

et où  $\varphi_r(E_{ir'})$  est la partie de la perturbation due au mode interne, qui est donnée par

$$\begin{aligned} \varphi_r(E_{ir'}) &= \frac{m\lambda_r}{nkT_t C_v T_t} \left( \frac{E_{ir'} - E_r(T_t)}{kT_t} \right) \nabla T_t \cdot V' \\ &+ \frac{m\lambda_r}{nkT_t C_v} \left( \frac{mV'^2}{3kT_t} - 1 - \frac{E_{ir'} - E_r(T_t)}{C_v T_t} \right) \nabla \cdot U . \end{aligned} \quad (4.43)$$

On peut maintenant à partir des éléments ci-dessus, calculer les flux de translation et de rotation à la paroi.

#### - calcul du flux de translation $Q_{tra}$

A partir de la définition de  $Q_{tra}$ , et de la relation (3.4) liant  $f_i^-$  et  $f_i^+$  on a

$$\begin{aligned} Q_{tra} &= \frac{1}{2} m \int_{\Omega'} \left[ |V'_x| V'^2 \sum_{ir'} f_i^- \right] d\xi' - \\ &\frac{1}{2} m \int_{\Omega'} \left[ |V'_x| \sum_{ir'} f_i^- \left( \sum_{ir} \int_{\Omega} V^2 B(\xi', E_{ir'}, g_{ir'}, \xi, E_{ir}, g_{ir}) d\xi \right) \right] d\xi' \end{aligned}$$

En utilisant l'expression de l'opérateur de réflexion du gaz polyatomique, construit au chapitre 3 (relation (3.15)), restreint au seul mode interne de rotation, on obtient aisément

$$\sum_{ir} \int_{\Omega} V^2 B(\xi', E_{ir'}, g_{ir'}, \xi, E_{ir}, g_{ir}) d\xi = \int_{\Omega} V^2 P_x P_y P_z$$

D'autre part, en utilisant l'expression de  $f_i^-$  donnée en (4.41) et l'expression de  $F_i$  (4.39), on voit que

$$\sum_{ir'} f_i^- = F_0(V') [1 + \varphi_t(V')] - \sum_{ir'} F_i \varphi_r(E_{ir'}) .$$

Dans cette dernière relation, la dernière somme sur  $ir'$ , dans le membre de droite, se transforme à partir des expressions de  $F_i$ , de  $\varphi_r(E_{ir'})$ , et de la définition de l'énergie moyenne de rotation. On obtient

$$\sum_{ir'} F_i \varphi_r(E_{ir'}) = \frac{m\lambda_r}{nkT_t C_v} \left( \frac{mV'^2}{3kT_t} - 1 \right) F_0(V') \nabla \cdot U \quad (4.44)$$

On peut donc réécrire l'expression de  $Q_{tra}$  comme suit,

$$\begin{aligned} Q_{tra} &= \frac{1}{2} m \int_{\Omega'} |V'_x| V'^2 f^-(V') d_{\xi'} - \frac{1}{2} m \int_{\Omega'} |V'_x| \left( \int_{\Omega} V^2 P_x P_y P_z d_{\xi} \right) f^-(V') d_{\xi'} \\ &\quad - \frac{m^2 \lambda_r}{2nkT_t C_v} \nabla \cdot U \left\{ \int_{\Omega'} |V'_x| V'^2 \left( \frac{mV'^2}{3kT_t} - 1 \right) F_0(V') d_{\xi'} \right. \\ &\quad \left. - \int_{\Omega'} |V'_x| \left( \int_{\Omega} V^2 P_x P_y P_z d_{\xi} \right) \left( \frac{mV'^2}{3kT_t} - 1 \right) F_0(V') d_{\xi'} \right\} \end{aligned} \quad (4.45)$$

où l'on a noté  $f^-(V')$  le terme  $F_0(V')[1 + \varphi_t(V')]$ . Dans cette dernière expression de  $Q_{tra}$ , on peut remarquer que la première ligne représente l'expression littérale du flux de chaleur calculée dans le cas monoatomique, et dont le résultat est donné par (4.11) et (4.12), lorsque  $\lambda_c$  est remplacé par  $\lambda_t$ . En utilisant de plus, le résultat de la relation (3.26), on est alors conduit à

$$\begin{aligned} Q_{tra} &= Q_{0M} + Q_{0\varphi} - \frac{m^2 \lambda_r}{2nkT_t C_v} \nabla \cdot U \times \\ &\quad \left[ \int_{\Omega'} |V'_x| \left( \alpha_x V_x'^2 + \alpha_y V_y'^2 + \alpha_z V_z'^2 - \sigma_0 C_w^2 - \alpha_y U_y^2 - \alpha_z U_z^2 \right) \left( \frac{mV'^2}{3kT_t} - 1 \right) F_0(V') d_{\xi'} \right] \end{aligned} \quad (4.46)$$

On trouve les diverses intégrales qui interviennent sur la deuxième ligne de l'expression (4.46) dans les tables d'intégrales de la fonction  $F_0(V')$  figurant dans les Annexes, si l'on remarque qu'au contact de la paroi, intégrer en  $d_{\xi'}$  revient à intégrer en  $d_{V'}$ . Il en résulte,

$$\begin{aligned} Q_{tra} &= Q_{0M} + Q_{0\varphi} - \frac{m^2 \lambda_r}{2nkT_t C_v} \nabla \cdot U \times \\ &\quad \left[ \frac{m}{3kT_t} \frac{3nC^5}{4\sqrt{\pi}} (\alpha_x + \alpha_y + \alpha_z) - \sigma_0 \frac{nC^3}{2\sqrt{\pi}} - \left( \frac{m}{3kT_t} \frac{nC^3}{\sqrt{\pi}} - \frac{nC}{2\sqrt{\pi}} \right) (\sigma_0 C_w^2 + \alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2) \right] \end{aligned} \quad (4.47)$$

que l'on peut encore réécrire

$$\begin{aligned} Q_{tra} &= Q_{0M} + Q_{0\varphi} \\ &\quad - \frac{m\lambda_r}{C_v} \frac{(\alpha_y + \alpha_z)}{4} \sqrt{\frac{2kT_t}{\pi m}} \nabla \cdot U \times \left[ 1 - \frac{2}{3(\alpha_y + \alpha_z)} \left( \sigma_0 \frac{C_w^2}{C^2} + \alpha_y \frac{U_y^2}{C^2} + \alpha_z \frac{U_z^2}{C^2} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.48)$$

Le flux de chaleur de translation est donc donné par la somme de deux termes : une partie semblable au flux de chaleur obtenue dans le cas monoatomique et un terme où figurent des effets de dilatation volumique (ou de compression) dus à l'excitation du mode de rotation.

#### - calcul du flux de rotationnel $Q_{rot}$

A partir de la définition de  $Q_{rot}$ , et de la relation (3.4) liant  $f_i^-$  et  $f_i^+$  on a

$$Q_{rot} = \sum_{ir'} \int_{\Omega'} |V'_x| E_{ir'} f_i^- d_{\xi'} - \sum_{ir'} \int_{\Omega'} |V'_x| f_i^- \left( \int_{\Omega} \sum_{ir} E_{ir} P_x P_y P_z P_r d_{\xi} \right) d_{\xi'}$$

Dans cette expression la sommation figurant dans la parenthèse a déjà été rencontrée dans les calculs de la page 48 ; on trouve

$$\int_{\Omega} \sum_{ir} E_{ir} P_x P_y P_z P_r d\xi = (1 - \alpha_r) E_{ir'} + \alpha_r E_r(T_w)$$

Le flux de rotation s'écrit alors

$$Q_{rot} = \alpha_r \int_{\Omega'} |V_x'| \sum_{ir'} (E_{ir'} - E_r(T_w)) f_i^- d\xi'$$

ou encore en explicitant le  $f_i^-$ ,

$$Q_{rot} = \alpha_r \int_{\Omega'} |V_x'| \sum_{ir'} [E_{ir'} F_i + E_{ir'} F_i \varphi_t(V') - E_{ir'} F_i \varphi_r(E_{ir'})] d\xi' \\ - \alpha_r E_r(T_w) \int_{\Omega'} |V_x'| [F_0 + F_0 \varphi(V')] d\xi' + \alpha_r E_r(T_w) \int_{\Omega'} |V_x'| \sum_{ir'} F_i \varphi_r(E_{ir'}) d\xi'$$

Il faut maintenant évaluer les trois sommes discrètes apparaissant sous les intégrales de la première ligne, sachant que la dernière somme discrète sur la deuxième ligne est donnée en (4.44). Les deux premières sommes sont exprimées assez simplement à l'aide de l'énergie moyenne de rotation d'ordre zéro ; on trouve

$$\sum_{ir'} E_{ir'} F_i = E_r(T_t) F_0(V') \quad \text{et} \quad \sum_{ir'} E_{ir'} F_i \varphi_t(V') = E_r(T_t) \varphi_t(V') F_0(V')$$

En ce qui concerne la troisième somme, on obtient

$$\sum_{ir'} E_{ir'} F_i \varphi_r(E_{ir'}) = F_0(V') \frac{m\lambda_r}{nkT_t C_v^r T_t} \nabla T_t \cdot V' \sum_{ir'} E_{ir'} \left( \frac{E_{ir'} - E_r(T_t)}{kT_t} \right) \frac{g_{ir'} e^{-\frac{E_{ir'}}{kT_t}}}{Q_r(T_t)} \\ + F_0(V') \frac{m\lambda_r}{nkT_t C_v} \nabla \cdot U \sum_{ir'} E_{ir'} \left( \frac{mV'^2}{3kT_t} - 1 - \frac{E_{ir'} - E_r(T_t)}{C_v^r T_t} \right) \frac{g_{ir'} e^{-\frac{E_{ir'}}{kT_t}}}{Q_r(T_t)} .$$

Cette somme fait donc appel à la moyenne quadratique de l'énergie interne de rotation sur la distribution de Boltzmann partielle associée au mode de rotation : or la moyenne quadratique de l'énergie interne, ainsi définie, est liée à la chaleur spécifique de mode interne par la relation (Voir par exemple les Annexes de la réf. [2])

$$\sum_{ir'} \frac{E_{ir'}^2}{kT_t} \frac{g_{ir'} e^{-\frac{E_{ir'}}{kT_t}}}{Q_r(T_t)} - \frac{(E_r(T_t))^2}{kT_t} = (kT_t) \frac{C_v^r}{k} \quad (4.49)$$

En utilisant cette relation (4.49), la troisième somme devient

$$\sum_{ir'} E_{ir'} F_i \varphi_r(E_{ir'}) = F_0(V') \frac{m\lambda_r}{nkT_t} \nabla T_t \cdot V' \quad (4.50) \\ + F_0(V') \frac{m\lambda_r}{nkT_t C_v} \nabla \cdot U \left[ E_r(T_t) \left( \frac{mV'^2}{3kT_t} - 1 \right) - kT_t \right] .$$

Finalement en rassemblant toutes ces sommes discrètes, le flux total de rotation à la paroi s'écrit

$$\begin{aligned}
Q_{rot} = & \alpha_r [E_r(T_t) - E_r(T_w)] \int_{\Omega'} |V'_x| [F_0 + F_0\varphi(V')] d\xi' \\
& - \alpha_r \frac{m\lambda_r}{nkT_t C_v} \nabla \cdot U [E_r(T_t) - E_r(T_w)] \int_{\Omega'} |V'_x| \left( \frac{mV'^2}{3kT_t} - 1 \right) F_0(V') d\xi' \\
& - \alpha_r \frac{m\lambda_r}{nkT_t} \frac{\partial T_t}{\partial x} \int_{\Omega'} |V'_x| V'_x F_0(V') d\xi' + \alpha_r \frac{m\lambda_r}{nkT_t C_v} kT_t \nabla \cdot U \int_{\Omega'} |V'_x| F_0(V') d\xi'
\end{aligned} \tag{4.51}$$

Une fois encore, dans la relation (4.51), n'interviennent plus que des intégrales sur la fonction  $F_0(V')$ . Le calcul de l'intégrale dépendant de  $F_0\varphi(V')$ , est donnée par, (Voir le calcul détaillé en Annexe)

$$\int_{\Omega'} |V'_x| [F_0 + F_0\varphi(V')] d\xi' = \frac{nC}{2\sqrt{\pi}} + \frac{\mu C}{6kT_t\sqrt{\pi}} \left[ 3 \frac{\partial U_x}{\partial x} - \nabla \cdot U \right] \tag{4.52}$$

Les autres intégrales de la relation (4.51) faisant intervenir  $F_0(V')$  figurent dans les tables d'intégrales données en Annexes. En remplaçant ces différentes intégrales par leurs expressions dans (4.51), on obtient pour l'expression finale du flux de rotation

$$\begin{aligned}
Q_{rot} = & \alpha_r [E_r(T_t) - E_r(T_w)] \times \left[ \frac{nC}{2\sqrt{\pi}} + \frac{\mu C}{6kT_t\sqrt{\pi}} \left( 3 \frac{\partial U_x}{\partial x} - \nabla \cdot U \right) \right] \\
& - \alpha_r \frac{m\lambda_r}{nkT_t C_v} \nabla \cdot U \frac{nC}{6\sqrt{\pi}} [E_r(T_t) - E_r(T_w)] \\
& + \alpha_r \frac{\lambda_r}{2} \frac{\partial T_t}{\partial x} + \alpha_r \frac{m\lambda_r}{C_v} \frac{C}{2\sqrt{\pi}} \nabla \cdot U
\end{aligned} \tag{4.53}$$

#### - Expression du saut de température à la paroi

Le flux d'énergie totale au contact de la paroi est donné par la somme du flux de translation et de rotation ; soit en écriture explicite,

$$\begin{aligned}
Q_{tra} + Q_{rot} = & \frac{nk}{2} \sqrt{\frac{2kT_t}{\pi m}} (\sigma_0 + \alpha_r) (T_t - T_w) + \frac{\sigma_1}{10} \lambda_t \frac{\partial T_t}{\partial x} \\
& + \alpha_r \frac{\lambda_r}{2} \frac{\partial T_t}{\partial x} + \alpha_r \frac{m\lambda_r}{2C_v} \sqrt{\frac{2kT_t}{\pi m}} \nabla \cdot U - \frac{\alpha_r}{6} \frac{m\lambda_r}{T_t C_v} \sqrt{\frac{2kT_t}{\pi m}} \nabla \cdot U (T_t - T_w) \\
& - \frac{m\lambda_r}{C_v} \frac{(\alpha_y + \alpha_z)}{4} \sqrt{\frac{2kT_t}{\pi m}} \nabla \cdot U \left[ 1 - \frac{2}{3(\alpha_y + \alpha_z)} \left( \sigma_0 \frac{C_w^2}{C^2} + \alpha_y \frac{U_y^2}{C^2} + \alpha_z \frac{U_z^2}{C^2} \right) \right] \\
& + \frac{\mu C}{6T_t\sqrt{\pi}} \left( 3 \frac{\partial U_x}{\partial x} - \nabla \cdot U \right) \left[ \alpha_r (T_t - T_w) - \frac{m}{2k} (\sigma_0 C_w^2 + \alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2) \right] \\
& + \frac{\mu m C^3}{4kT_t\sqrt{\pi}} \left[ 3\alpha_x \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\alpha_y - \alpha_z}{2} \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\alpha_z - \alpha_y}{2} \frac{\partial U_z}{\partial z} \right] \\
& - \frac{mnC}{4\sqrt{\pi}} (\alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2) .
\end{aligned} \tag{4.54}$$

Le flux total à l'entrée de la couche de Knudsen, c'est à dire à la limite de validité des équations du continuum s'écrit,

$$\lambda_t \frac{\partial T_t}{\partial x} + \lambda_r \frac{\partial T_t}{\partial x} . \tag{4.55}$$

En appliquant la conservation du flux total entre l'entrée de la couche de Knudsen et la position  $x = 0$ , on déduit la relation suivante au contact de la paroi

$$\begin{aligned}
T_t - T_w &= \frac{1}{nk} \sqrt{\frac{\pi m}{2kT_t}} \left[ \frac{(2 - \frac{\sigma_1}{5})}{(\sigma_0 + \alpha_r)} \lambda_t \frac{\partial T_t}{\partial x} + \frac{(2 - \alpha_r)}{(\sigma_0 + \alpha_r)} \lambda_r \frac{\partial T_t}{\partial x} \right] \\
&\quad - \frac{m\lambda_r}{2nkC_v} \left[ \frac{2\alpha_r - (\alpha_y + \alpha_z)}{\sigma_0 + \alpha_r} \right] \nabla \cdot U \\
&\quad + \frac{1}{(\sigma_0 + \alpha_r)} \frac{m\lambda_r}{3nkC_v} \left[ \alpha_r - \frac{T_w}{T_t} (\alpha_r + \sigma_0) - \left( \alpha_y \frac{U_y^2}{C^2} + \alpha_z \frac{U_z^2}{C^2} \right) \right] \nabla \cdot U \\
&\quad - \frac{\mu}{3nk(\sigma_0 + \alpha_r)} \left( 3 \frac{\partial U_x}{\partial x} - \nabla \cdot U \right) \left[ \alpha_r - \frac{T_w}{T_t} (\alpha_r + \sigma_0) - \left( \alpha_y \frac{U_y^2}{C^2} + \alpha_z \frac{U_z^2}{C^2} \right) \right] \\
&\quad - \frac{\mu}{nk(\sigma_0 + \alpha_r)} \left[ 3\alpha_x \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\alpha_y - \alpha_z}{2} \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\alpha_z - \alpha_y}{2} \frac{\partial U_z}{\partial z} \right] \\
&\quad + \frac{m}{2k(\sigma_0 + \alpha_r)} (\alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2) .
\end{aligned} \tag{4.56}$$

que l'on peut encore réécrire,

$$\begin{aligned}
T_t - T_w &= \frac{1}{nk} \sqrt{\frac{\pi m}{2kT_t}} \left[ \frac{(2 - \frac{\sigma_1}{5})}{(\sigma_0 + \alpha_r)} \lambda_t \frac{\partial T_t}{\partial x} + \frac{(2 - \alpha_r)}{(\sigma_0 + \alpha_r)} \lambda_r \frac{\partial T_t}{\partial x} \right] \\
&\quad - \frac{m\lambda_r}{2nkC_v} \left[ \frac{2\alpha_r - (\alpha_y + \alpha_z)}{\sigma_0 + \alpha_r} \right] \nabla \cdot U \\
&\quad - \frac{1}{3nk(\sigma_0 + \alpha_r)} \left( \frac{m\lambda_r}{C_v} + \mu \right) \left[ (\alpha_r + \sigma_0) \frac{T_w}{T_t} - \alpha_r + \left( \alpha_y \frac{U_y^2}{C^2} + \alpha_z \frac{U_z^2}{C^2} \right) \right] \nabla \cdot U \\
&\quad + \frac{\mu}{nk(\sigma_0 + \alpha_r)} \left[ (\alpha_r + \sigma_0) \frac{T_w}{T_t} - \alpha_r + \left( \alpha_y \frac{U_y^2}{C^2} + \alpha_z \frac{U_z^2}{C^2} \right) \right] \frac{\partial U_x}{\partial x} \\
&\quad - \frac{\mu}{nk(\sigma_0 + \alpha_r)} \left[ 3\alpha_x \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\alpha_y - \alpha_z}{2} \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\alpha_z - \alpha_y}{2} \frac{\partial U_z}{\partial z} \right] \\
&\quad + \frac{m}{2k(\sigma_0 + \alpha_r)} (\alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2) .
\end{aligned} \tag{4.57}$$

Dans cette relation de saut de température pour un gaz polyatomique, on peut retrouver le saut de température du gaz monoatomique en posant  $\alpha_r = 0$  et en négligeant le flux de chaleur de rotation à l'entrée de la couche. On observe ainsi que cette relation a globalement les mêmes structures que dans le cas monoatomique. Mais, ce qui retient l'attention ici, c'est la contribution des termes de dilatation volumique ou de compression, dus à l'excitation des modes internes (les termes en  $\lambda_r \nabla \cdot U$ ), et qui sont, en termes classiques, les effets d'une viscosité de volume.

En réalité les effets de la viscosité de volume ne deviennent sensibles que dans un écoulement où le gradient de densité volumique devient grand (i.e où la variation relative de densité devient assez sensible). Ceci se voit assez facilement à travers l'équation de conservation de masse qui s'écrit comme on sait

$$\frac{1}{\rho} \frac{D\rho}{Dt} = \nabla \cdot U \tag{4.58}$$

Cette équation de conservation est valable quelque soit le régime d'écoulement. Or, la région proche de la paroi définie comme couche de Knudsen, apparaît effectivement comme



une région où le gradient de densité peut être plus important que dans l'écoulement extérieur (à cause de la variation sensible de la densité sur une petite distance de l'ordre du libre parcours moyen). Ainsi, l'on adopte la relation que l'on écrit en théorie ordinaire de couche limite thermique, pour une configuration monodimensionnelle [72],

$$\frac{1}{n} \frac{\partial n}{\partial x} \approx -\frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (4.59)$$

alors, compte tenu des relations (4.59) et (4.58), la relation établie en (4.57), montre clairement que les effets de viscosité de volume (i.e. les effets des termes en  $div U$ ) sur le saut de température à la paroi, ne peuvent être négligés notamment si l'écoulement est à grande vitesse ou à basse pression. Évidemment ces termes, n'apparaissent pas dans les expressions existantes de saut de température en polyatomique, qui décrivent des configurations sans mouvement macroscopique [2, 55]. Une analyse plus complète permettra d'évaluer plus rigoureusement les effets de l'excitation du mode interne de rotation et donc les effets de la viscosité de volume sur le saut de température à la paroi.

### 4.4.3 Cas de plusieurs modes internes dont l'un en déséquilibre

On considère le cas de plusieurs modes internes excités, par exemple le cas où la rotation est en équilibre avec la translation et la vibration hors d'équilibre. Les calculs des divers flux de chaleur, de vibration, de rotation et de translation, restent formellement les mêmes. Néanmoins, la présence d'un mode hors d'équilibre, entraîne la présence de plusieurs températures dans les expressions de flux de chaleur. Ainsi une application de la conservation globale du flux de chaleur entre l'entrée de la couche de Knudsen et le contact de la paroi, comme dans le cas du calcul du saut de température développé dans la section précédente, conduit à une relation globale, liant les différentes températures au contact de la paroi. On pourrait alors établir un saut de température en admettant une conservation de chaque flux partiel entre l'entrée de la couche et le contact de la paroi : conservation du flux de vibration d'un côté, et conservation du flux de translation-rotation de l'autre, ce qui conduirait à une relation de saut de température de rotation et une relation de saut de température de translation complètement découplées [2]. Même si certains travaux expérimentaux et théoriques [54] semblent indiquer que dans une telle situation l'échange du flux de vibration à la paroi est faible devant l'échange du flux de chaleur de translation-rotation, on ne peut en déduire rigoureusement la conservation du flux de vibration à travers la couche de Knudsen. Dès lors, pour modéliser, même sommairement, les échanges à la paroi, il faudrait introduire de nouveaux coefficients phénoménologiques d'échanges inter-modes.

# Chapitre 5

## Applications : quelques exemples particuliers

Dans ce chapitre on présente quelques applications des modèles théoriques construits précédemment. On compare ainsi les résultats donnés par les lois de réflexion et les conditions aux limites établies aux chapitres précédents à d'autres résultats théoriques ou expérimentaux, et on insiste sur quelques cas où les relations classiques d'interaction gaz/paroi paraissent remises en question. Dans la première partie du chapitre, on compare d'abord les coefficients de glissement de vitesse obtenus à partir de la vitesse de glissement du chapitre précédent avec des valeurs expérimentales. On aborde ensuite un problème théorique récent apparu dans la littérature qui est celui de l'inversion de profil de vitesse en écoulement de Couette cylindrique. La deuxième partie du chapitre concerne les coefficients aérodynamiques. Dans cette deuxième partie, on procède aux calculs de coefficients aérodynamiques en régime moléculaire libre à partir des lois de réflexions précédentes. On remarque alors que la loi de réflexion décrite précédemment conduit à une description des coefficients aérodynamiques qui se rapproche de celle qu'avaient imaginée *Schaff et Chambré* [20]. La comparaison des résultats avec les résultats expérimentaux existant dans ce domaine est assez satisfaisante.

### 5.1 Longueur de glissement et coefficient de glissement

#### 5.1.1 Définitions et expressions

La notion de longueur de glissement a été introduite, dans le régime des écoulements glissants pour évaluer la vitesse de glissement. Elle est définie dans le cas d'un écoulement généré uniquement par gradient de vitesse, et relie la vitesse de glissement à la contrainte exercée, à la paroi. On exprime alors une longueur de glissement  $\zeta_0$ , à travers la relation

$$U_{slip} = \zeta_0 \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right) \quad (5.1)$$

l'adimensionnement de la longueur de glissement par le libre parcours moyen conduit à définir le coefficient de glissement  $\sigma_v$ , par

$$\zeta_0 = \sigma_v \lambda_m \quad (5.2)$$

L'expression de la vitesse de glissement, unidimensionnelle, qui est donnée par Maxwell, s'écrit

$$U_{slip} = \frac{2 - \alpha}{\alpha} \frac{\mu}{mn} \sqrt{\frac{m\pi}{2kT_0}} \frac{\partial U_y}{\partial x}. \quad (5.3)$$

La longueur de glissement  $\zeta_{0M}$ , et le coefficient de glissement  $\sigma_{v_M}$ , que l'on déduit de cette relation classique de vitesse de glissement sont donc

$$\zeta_{0M} = \frac{2 - \alpha}{\alpha} \frac{\mu}{mn} \sqrt{\frac{m\pi}{2kT_0}} \quad \text{et} \quad \sigma_{v_M} = \frac{(2 - \alpha)}{\alpha} \quad (5.4)$$

Avant de présenter quelques comparaisons quantitatives entre les expressions de la vitesse de glissement établies aux chapitres précédents et d'autres résultats, il est indispensable de noter qu'il existe souvent dans les expressions certaines différences qui proviennent de définitions différentes du libre parcours moyen en théorie cinétique des gaz. De même, il existe aussi parfois des différences provenant de la façon dont on introduit la viscosité. Ainsi, dans les expressions établies au chapitre 4 (section 4.2.2) à partir de la fonction de distribution de Chapman, la viscosité apparaissant dans les résultats, découle de la théorie de viscosité d'après Chapman [21]; alors que dans les relations (5.3) et (5.4), la viscosité est introduite suivant un concept empirique de Maxwell [51]. Pour rendre cohérents les concepts de viscosité et les différentes définitions de libres parcours moyens utilisées entre (4.26) et (5.3), on peut ajuster les deux expressions en se plaçant dans la même situation d'accommodation totale à la paroi. La correction est alors de  $\frac{3\pi}{2}$  sur la longueur de glissement. Prenant en compte cette correction, la longueur de glissement et le coefficient de glissement qu'on déduit de l'expression de la vitesse de glissement établie en (4.26), en utilisant les définitions (5.1) et (5.2), s'écrivent alors respectivement

$$\zeta_0 = \frac{3\mu}{mn} \sqrt{\frac{\pi m}{2kT_0}} \frac{(2 - \gamma + \beta \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}})}{(4 - \gamma + \beta \sqrt{\frac{T_0}{T_w}})} \quad (5.5)$$

et

$$\sigma_v = 3 \frac{(2 - \gamma + \beta \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}})}{(4 - \gamma + \beta \sqrt{\frac{T_0}{T_w}})} . \quad (5.6)$$

Le coefficient de glissement varie en fonction des propriétés du couple gaz/paroi, par l'intermédiaire du couple de coefficients d'accommodation (normal et tangentiel) intervenant dans l'expression (5.6), mais reste dans une gamme de valeurs bien définies. D'une manière plus précise, si on néglige le saut de température entre le gaz et la paroi, on peut voir que le coefficient de glissement varie entre 1 et 1.93. Il apparaît alors que l'influence des propriétés du couple gaz/paroi sur le coefficient de glissement donné par la relation (5.6) est nettement différente de la variation du coefficient de glissement que prévoit le modèle classique, dépendant du coefficient d'accommodation maxwellien et donné par la relation (5.4).

### 5.1.2 Comparaison avec les coefficients de glissement expérimentaux

Les comparaisons quantitatives rigoureuses du coefficient de glissement restent assez difficiles à réaliser. La raison principale qu'on peut invoquer est la difficulté propre à la mesure du champ de vitesse dans les configurations d'écoulements où le glissement de vitesse est présent. Néanmoins, il existe des techniques de mesure indirectes du coefficient de glissement. Ces techniques de mesure passent par l'utilisation de certaines relations théoriques dans lesquelles intervient le coefficient de glissement. Mais, ces relations théoriques sont souvent elles mêmes liées à un modèle cinétique particulier ou, plus encore, à un modèle d'interaction gaz/paroi, ce qui compromet l'authenticité des comparaisons théorie/expérience.

On a choisit de comparer ici, les coefficients de glissement théoriques avec les valeurs expérimentales données par *Porodnov et.al.* [24] (Table 5.1). Il s'agit de mesures de coefficients de glissement de différents gaz sur différents types de surfaces. Ces valeurs ne dépendent d'aucun modèle particulier d'interaction à la paroi. Lorsqu'on parcourt le tableau 5.1, en déclinant les différents couples gaz/paroi, le coefficient de glissement varie en fonction du couple considéré mais reste compris entre 1 et 2.

He	Ne	Ar	Kr	Xe	H2	D2	CO2
1.24	1.25	1.31	1.23	1.33	1.22	1.27	-
1.49	1.56	1.46	1.39	1.38	1.37	1.41	1.24
1.53	1.59	1.33	-	-	-	1.57	-
1.02	1.71	1.35	-	-	1.46	1.37	-

Tab. 5.1: Valeurs expérimentales du coefficient de glissement de différents gaz sur différentes surfaces [24].

$\alpha_y$	1	0.8	0.7	0.6	0.5	0.4	0.2	0.1
$\sigma_v$	1	1.5	1.86	2.33	3	4	9	19

Tab. 5.2: Coefficient de glissement obtenu avec la relation de Maxwell, en fonction de son coefficient d'accommodation  $\alpha$ .

$\alpha_x$	$\alpha_y =$	1	0.9	0.8	0.7	0.5	0.4	0.1	0
1	1	1	1.12	1.23	1.34	1.53	1.61	1.86	1.93
0.9	1	1	1.11	1.22	1.32	1.50	1.59	1.82	1.88
0.7	1	1	1.10	1.20	1.29	1.46	1.53	1.74	1.80
0.4	1	1	1.09	1.28	1.24	1.38	1.45	1.62	1.67
0.1	1	1	1.07	1.14	1.20	1.31	1.36	1.50	1.59

Tab. 5.3: Coefficient de glissement obtenu avec la relation (5.6) suivant le couple de coefficients ( $\alpha_x$ ,  $\alpha_y$ )

Le tableau de coefficients de glissement (5.3), obtenu à l'aide de la nouvelle relation théorique (5.6) est beaucoup plus compatible avec les résultats expérimentaux de la table (5.1) que ne le sont les résultats donnés par l'expression de Maxwell dans la table (5.2). On a un coefficient de glissement théorique qui augmente faiblement avec le coefficient d'accommodation normal et diminue sensiblement quand le coefficient d'accommodation tangentiel croit, tout en restant dans la gamme de valeurs obtenues expérimentalement.

## 5.2 Le problème d'inversion de profil en écoulement de Couette cylindrique

On considère l'écoulement isotherme d'un gaz raréfié entre deux cylindres coaxiaux de rayon  $R_1$  et  $R_2$ . Le cylindre intérieur de rayon  $R_1$  en rotation de vitesse angulaire constante  $\omega$  et le cylindre extérieur  $R_2$  immobile. Avec une particularité ici, qui est que les rayons  $R_1$  et  $R_2$  sont choisis de sorte que la distance séparant les deux cylindres soit

seulement de quelques multiples du libre parcours moyen. On a ainsi un écoulement de type Couette cylindrique de taille de quelques libres parcours moyens, donc un écoulement en régime de glissement, qu'il s'agit de décrire avec des modèles théoriques. A priori, compte tenu de la distance assez faible qui sépare les deux cylindres, il est naturel de penser que la description théorique d'un tel micro écoulement est fortement dépendant de la modélisation des conditions aux limites, donc de la modélisation des interactions des particules gazeuses avec la paroi. Si l'on utilise les équations de Navier Stokes avec conditions de glissement à la paroi pour modéliser l'écoulement, alors l'équation de la quantité de mouvement pour un tel écoulement s'écrit en coordonnées cylindriques  $(r, \theta)$  [15],

$$\frac{d^2 U_\theta(r)}{dr^2} + \frac{d}{dr} \left( \frac{U_\theta(r)}{r} \right) = 0 \quad (5.7)$$

où  $U_\theta(r)$  désigne le profil radial de la vitesse tangentielle. De plus, la condition aux limites de glissement (5.1) s'écrit en coordonnées cylindriques,

$$\text{pour } r = R_1 \text{ et } r = R_2, \quad U_\theta - U_w = \pm \zeta_0 \left( \frac{dU_\theta}{dr} - \frac{U_\theta}{r} \right), \quad (5.8)$$

où en  $r = R_1$  on a  $U_w = R_1 \omega$ , et en  $r = R_2$  on a  $U_w = 0$ .

La solution du système d'équations (5.7) et (5.8) s'écrit

$$U_\theta(r) = ar + \frac{b}{r} \quad (5.9)$$

où  $a$  et  $b$  sont des constantes que l'on détermine avec les conditions aux limites (5.8), et qui s'écrivent

$$a = \frac{A\omega}{A - B}, \quad b = -\frac{\omega}{A - B} \quad (5.10)$$

avec

$$A = \frac{1}{R_2^2} \left( 1 - 2 \frac{\zeta_0}{R_2} \right), \quad B = \frac{1}{R_1^2} \left( 1 + 2 \frac{\zeta_0}{R_1} \right). \quad (5.11)$$

On obtient facilement la dérivée de la vitesse tangentielle suivant la coordonnée radiale,

$$\frac{dU_\theta(r)}{dr} = \frac{\omega}{A - B} \left( A + \frac{1}{r^2} \right) \quad (5.12)$$

Le profil de vitesse est donc connu, à la longueur de glissement  $\zeta_0$  près, par la relation (5.9). En adimensionnant les vitesses par rapport à la vitesse de référence  $R_1 \omega$ , et les distances par rapport au libre parcours moyen  $\lambda_m$ , on obtient la forme suivante de cette vitesse tangentielle, où les notations étoilées désignent les grandeurs adimensionnées,

$$U_\theta^*(r^*) = \frac{R_1^*(1 - 2 \frac{\sigma_v}{R_2^*})}{R_1^{*2}(1 - 2 \frac{\sigma_v}{R_2^*}) - R_2^{*2}(1 + 2 \frac{\sigma_v}{R_1^*})} \left( r^* - \frac{R_2^{*2}}{r^*(1 - 2 \frac{\sigma_v}{R_2^*})} \right) \quad (5.13)$$

Le profil de vitesse ne dépend plus que du coefficient de glissement  $\sigma_v$  à la paroi.

### 5.2.1 L'inversion de profil avec une loi de réflexion de type Maxwell

Dans la relation (5.13), on va utiliser successivement les différentes expressions du coefficient de glissement propres aux différents modèles d'interactions à la paroi que l'on veut comparer. Dans cette première partie on choisit le modèle d'interaction spéculaire-diffuse de Maxwell. Le coefficient de glissement et la longueur de glissement sont alors ceux

de la relation (5.4). En prenant pour les rayons des cylindres  $R_1 = 3\lambda_m$  et  $R_2 = 5\lambda_m$ , une simple étude du signe de la dérivée (5.12) montre qu'il existe une valeur de  $\sigma_{v_M}$ , autrement dit une valeur de  $\alpha$ , à partir de laquelle la dérivée du profil de vitesse tangentiel (5.13) change globalement de signe. Autrement dit il existe une valeur de  $\alpha$  à partir de laquelle le mouvement du gaz est plus rapide le long du cylindre au repos que le long du cylindre en mouvement : on dit alors qu'il y a inversion de profil de vitesse. La figure 5.1 représente les profils de vitesse, entre les deux cylindres, tracés à l'aide de l'expression (5.13) pour différentes valeurs de  $\alpha$ . On observe ici une inversion du profil des vitesses pour les valeurs de  $\alpha$  égales ou inférieures à 0.1.

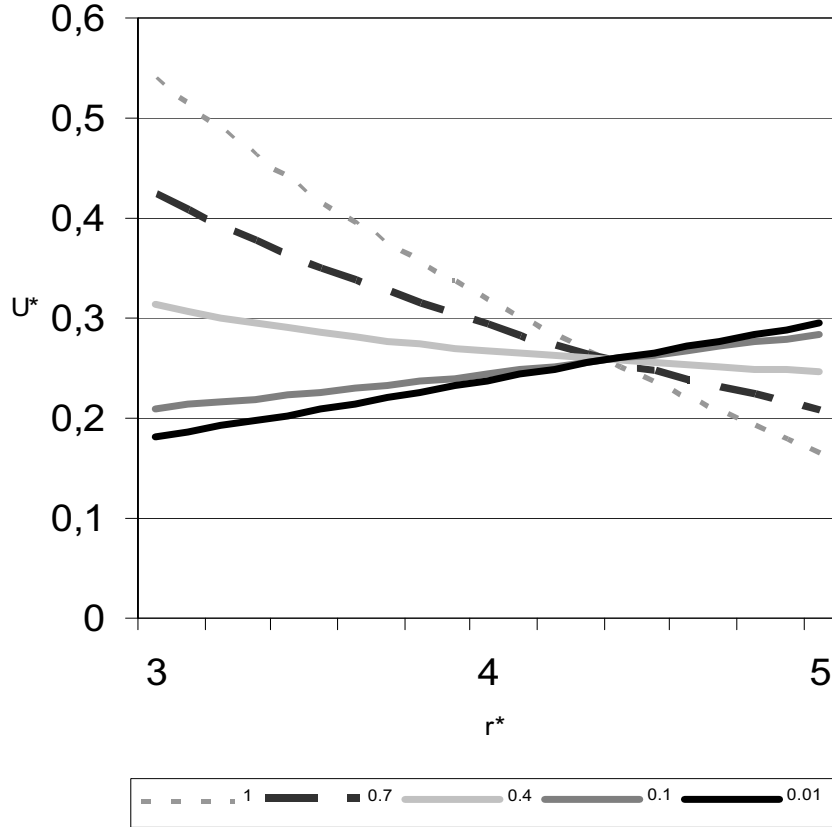


Fig. 5.1: Profil de vitesse avec la longueur de glissement de Maxwell pour divers valeur de  $\alpha$  : ( $\alpha = 1$ ,  $\alpha = 0.7$ ,  $\alpha = 0.4$  et  $\alpha = 0.1$ ), nombre de Knudsen  $K_n = 0.5$ . Inversion du profil pour les valeurs  $\alpha = 0.1$  et  $\alpha = 0.01$

En fait, la configuration définie par  $\{R_1 = 3\lambda_m$  et  $R_2 = 5\lambda_m\}$ , et correspondant à la figure 5.1, a été choisie au départ pour reproduire les mêmes configurations que celles qu'ont retenues les auteurs de travaux précédents où cette inversion du profil a été discutée [87, 56, 112]. Cette configuration correspond à un nombre de Knudsen égal à 0.5 ; ce qui est une valeur plutôt supérieure aux valeurs relevant de l'utilisation de Navier Stokes avec conditions aux limites de glissement. Mais, cela ne compromet pas pour autant la valeur qualitative des discussions que l'on peut mener sur l'inversion du profil. En effet, le changement d'allure du profil en fonction de  $\alpha$  et l'inversion demeurent présentes même pour des nombres de Knudsen plus faibles, choisis de façon à respecter le régime des écoulements glissants, comme sur la figure la 5.2 où le nombre de Knudsen est égal à 0.14. D'ailleurs lorsque les conditions aux limites à la paroi sont des conditions de type Maxwell

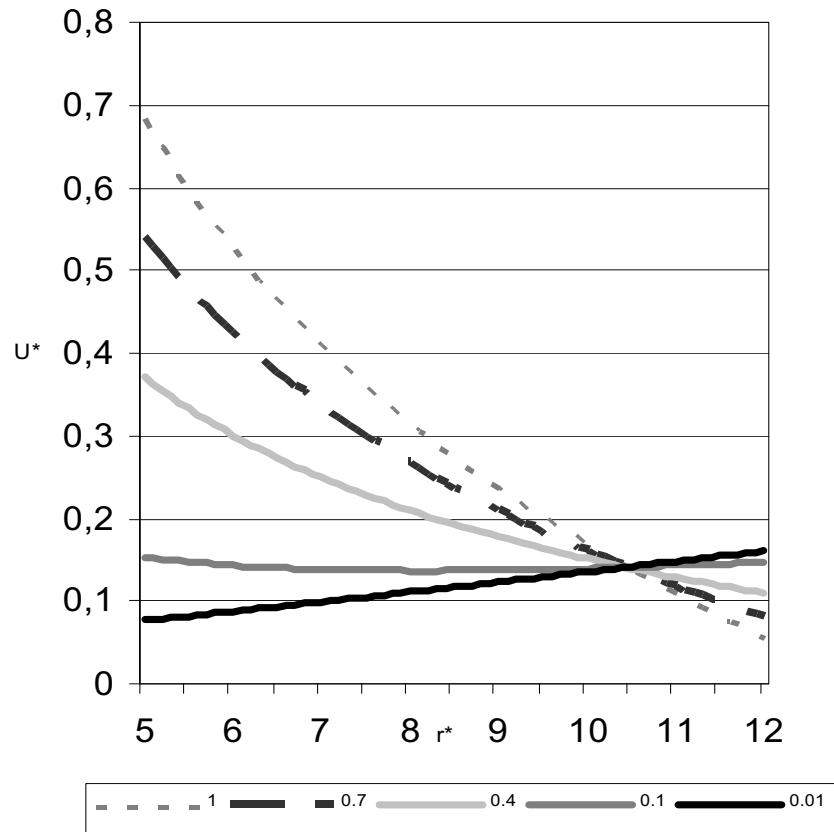


Fig. 5.2: Profil de vitesse avec la longueur de glissement de Maxwell pour divers valeur de  $\alpha$  : ( $\alpha = 1$ ,  $\alpha = 0.7$ ,  $\alpha = 0.4$  et  $\alpha = 0.1$ ), nombre de Knudsen  $K_n = 0.14$ . Inversion du profil pour les valeurs  $\alpha = 0.1$  et  $\alpha = 0.01$

caractérisées par un seul coefficient d'accommodation, l'utilisation des équations de Navier Stokes, corrigées par les conditions de glissement, n'est pas la seule méthode conduisant à ces inversions de profil. Ainsi *Aoki et al* [56], ont étudié la même configuration du problème de l'écoulement de Couette, en utilisant une méthode asymptotique et numérique pour l'équation de Boltzmann associée à une condition aux limites de type réflexion spéculaire-diffuse de Maxwell. *Tibbs, et. al* [87] ont pour leur part étudié le problème par la méthode de simulation directe (DSMC), en utilisant également la réflexion spéculaire-diffuse de Maxwell à la paroi. Les profils obtenus par *Aoki* et *Tibbs* sont exactement les mêmes que ceux représentés sur la figure 5.1.

La similitude de ces résultats sur l'inversion du profil, obtenu par diverses méthodes, mais avec la même condition limite de type Maxwell, ne prouve pas forcément la réalité du phénomène. Elle tend par contre à montrer que la description de ce type de configuration est très sensible à la modélisation de l'interaction à la paroi notamment à cause de la distance très faible séparant les deux cylindres.

## 5.2.2 Les profils avec la nouvelle loi de réflexion

Dans cette partie, on utilise les coefficients de glissement donnés par la nouvelle relation (5.6). Les profils obtenus alors à partir de la relation (5.13) sont représentés, pour une configuration de nombre de Knudsen égal à 0.5 sur la figure 5.3, et pour une configuration

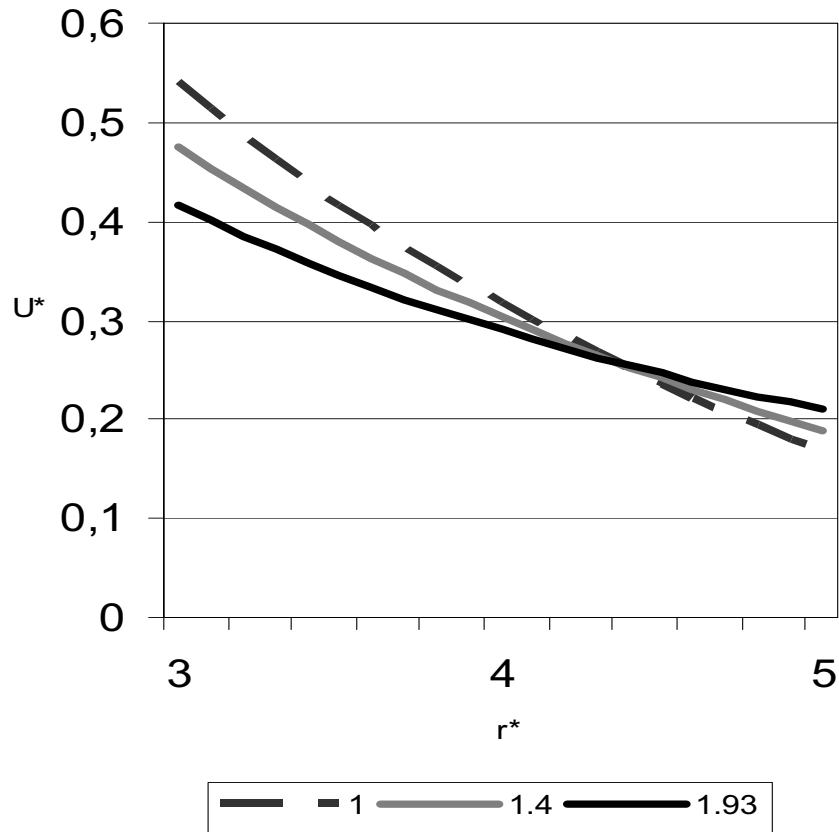


Fig. 5.3: Profil de vitesse avec les coefficients de glissement donnés par la relation (5.6) :  $\sigma_v = 1$ ,  $\sigma_v = 1.4$ , et la valeur limite à la réflexion spéculaire  $\sigma_v = 1.93$ . Nombre de Knudsen  $Kn = 0.5$ .

de nombre de Knudsen égal à 0.14 sur la figure 5.4, (pour les valeurs limites du coefficient de glissement.) Les deux figures montrent que les profils de vitesses ne présentent pas d'inversion de profil lorsque le coefficient de glissement décrit l'ensemble des valeurs permises. En somme, quelque soit le couple de coefficients d'accommodation ( $\alpha_x, \alpha_y$ ) choisi, les profils ne présentent pas d'énormes variations, contrairement au cas précédent.

On peut donc constater à travers cette analyse, que l'inversion du profil de vitesse évoquée dans certaines descriptions théoriques, peut être simplement due à une modélisation inadéquate des interactions gaz/paroi : ici par la relation de Maxwell associée à des valeurs faibles de  $\alpha$ . On a vérifié que cette inversion est en tout cas explicable de cette manière là dans le domaine où l'on peut utiliser l'approche continue de l'écoulement ( $Kn < 0.2$ ).

### 5.3 Coefficients aérodynamiques des satellites artificiels

Un des domaines dans lesquels la recherche théorique sur l'interaction gaz/paroi est très sollicitée, est celui de la prédiction des forces aérodynamiques sur les satellites artificiels en orbite circumterrestre. Une bonne prédiction de ces forces est en effet essentielle à la maîtrise des trajectoires de ces satellites.

La modélisation théorique de ce sujet peut être développée de la façon suivante : on considère une plaque plane sur laquelle arrive un écoulement de gaz raréfié hyperso-



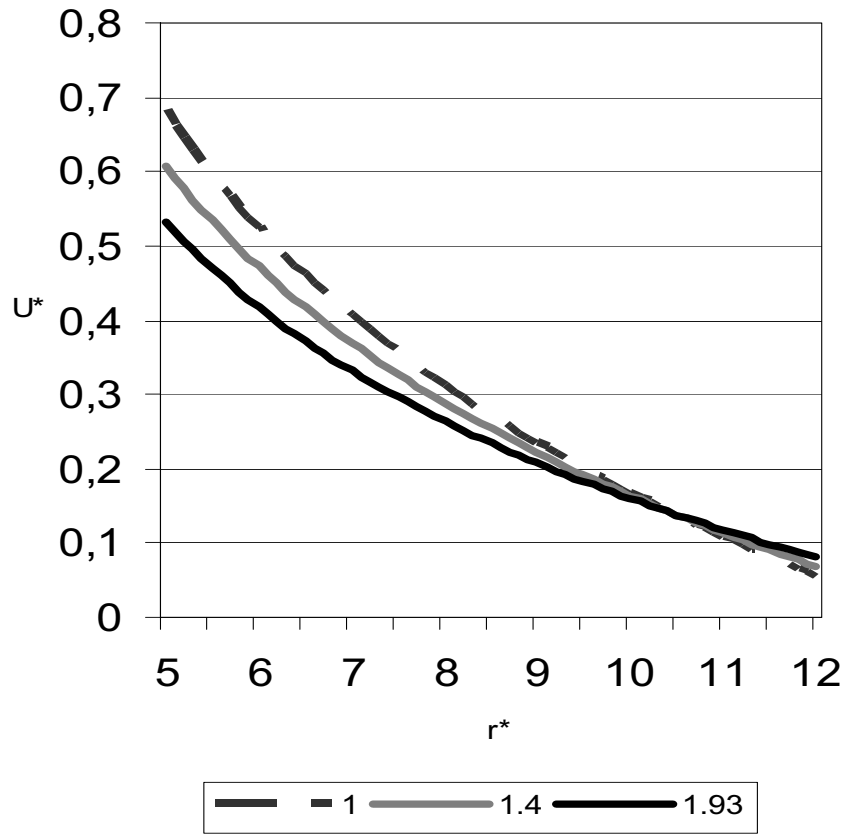


Fig. 5.4: Profil de vitesse avec les coefficients de glissement donnés par la relation (5.6) :  $\sigma_v = 1$ ,  $\sigma_v = 1.4$ , et la valeur limite à la réflexion spéculaire  $\sigma_v = 1.93$ . Nombre de Knudsen  $K_n = 0.14$ .

nique ( $Ma$  autour de 10.) L'écoulement de gaz incident est très raréfié et donc représenté par une distribution Maxwellienne, de densité numérique  $n_e$ , à une température incidente  $T_e$ , et une vitesse macroscopique incidente  $U_e = (U_{e_x}, U_{e_y}, U_{e_z})$  faisant un angle  $\theta_e$  avec la normale à la plaque plane. L'écoulement relève ici du régime moléculaire libre, car  $K_n > 10$ . La plaque est à sa température propre  $T_w$ , et le flux de gaz réfléchi aura une vitesse macroscopique, une température réfléchie, et une densité numérique propre  $n^+$  qui ne sont pas a priori égales aux paramètres caractérisant les molécules incidentes. La configuration spatiale est représentée sur la figure 5.5.

### 5.3.1 Le coefficient de traînée et le coefficient de portance

Pour étudier les forces aérodynamiques, on définit les flux de quantité de mouvement suivants

$$P_n = \Phi^+(|\xi_x|) + \Phi^-(|\xi'_x|) \quad (5.14)$$

$$P_\tau = \Phi^+(\xi_y) - \Phi^-(\xi'_y) \quad (5.15)$$

où les  $\Phi^-(M_\chi)$  et  $\Phi^+(M_\chi)$  sont les flux incidents et réfléchis de la quantité  $M_\chi$  caractérisant le gaz, tels qu'ils ont été définis à la page 40. Pour l'évaluation de  $P_n$  et de  $P_\tau$ , la nature du

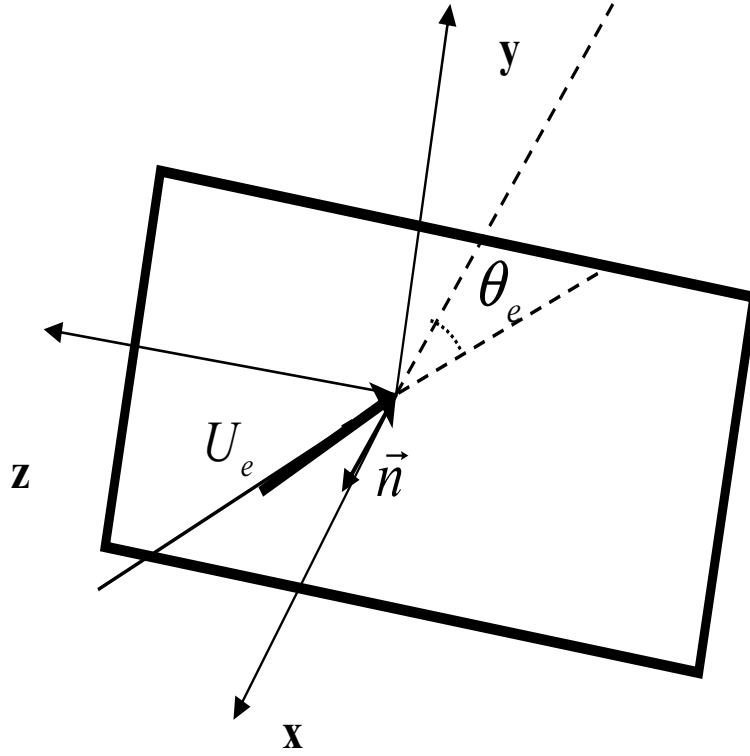


Fig. 5.5: Système d'axes dans un écoulement de gaz arrivant sur une paroi : la paroi correspond au plan  $(Y, Z)$ , la vitesse macroscopique  $U_e$  est prise dans le plan  $(X, Y)$ ,  $\theta_e$  est l'angle géométrique entre  $\vec{n}$  et  $U_e$ .

régime incident, nous permet d'écrire la fonction de distribution incidente sous la forme

$$f^-(\xi') = \frac{n_e}{(\sqrt{\frac{2kT_e}{m}}\pi)^3} e^{-\frac{m(\xi' - U_e)^2}{2kT_e}}. \quad (5.16)$$

Les flux réfléchis sont déterminés à l'aide de l'opérateur de réflexion  $\mathcal{B}(\xi', \xi)$  du chapitre 2. Or, dans le cadre des démonstrations de la page 40 concernant les coefficients  $\alpha_x$  et  $\alpha_y$ , les flux réfléchis des quantités  $|\xi_x|$  et  $\xi_y$ , donnés par l'opérateur de réflexion  $\mathcal{B}(\xi', \xi)$  du chapitre 2, s'expriment par les relations suivantes

$$\Phi^+(|\xi_x|) = (1 - \alpha_x)\Phi^- (|\xi'_x|) + \alpha_x\Phi^e (|\xi_x|) \quad (5.17)$$

$$\Phi^+(\xi_y) = (1 - \alpha_y)\Phi^- (\xi'_y) \quad (5.18)$$

soit pour  $P_n$  et  $P_\tau$

$$P_n = (2 - \alpha_x)\Phi^- (|\xi'_x|) + \alpha_x\Phi^e (|\xi_x|) \quad (5.19)$$

$$P_\tau = -\alpha_y\Phi^- (\xi'_y) \quad (5.20)$$

Il ne reste plus qu'à calculer  $\Phi^- (\xi'_y)$ ,  $\Phi^- (|\xi'_x|)$  et  $\Phi^e (|\xi_x|)$ . A partir de la fonction de distribution incidente (5.16), on a

$$\Phi^- (\xi'_y) = \frac{n_e}{(C_e\sqrt{\pi})^3} \int_{\Omega'} m|\xi'_x|\xi'_y e^{-\frac{((\xi'_x - U_{ex})^2 + (\xi'_y - U_{ey})^2 + \xi'_z{}^2)}{c_e^2}} d\xi' \quad (5.21)$$

ce qui donne

$$\Phi^-(\xi'_y) = -\frac{n_e k T_e U_{e_y}}{\sqrt{\pi} C_e} \left[ -e^{-\frac{U_{e_x}^2}{C_e^2}} + \frac{U_{e_x}}{C_e} \sqrt{\pi} \left( 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{U_{e_x}}{C_e}\right) \right) \right] \quad (5.22)$$

On tire alors pour expression de  $P_\tau$

$$P_\tau = -\alpha_y \frac{n_e k T_e U_{e_y}}{\sqrt{\pi} C_e} \left[ e^{-\frac{U_{e_x}^2}{C_e^2}} - \frac{U_{e_x}}{C_e} \sqrt{\pi} \left( 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{U_{e_x}}{C_e}\right) \right) \right]. \quad (5.23)$$

Pour le calcul de  $\Phi^-(|\xi'_x|)$ , on a

$$\Phi^-(|\xi'_x|) = \frac{n_e}{(\sqrt{\frac{2kT_e}{m}\pi})^3} \int_{\Omega'} m |\xi'_x|^2 e^{-\frac{m((\xi'_x - U_{e_x})^2 + (\xi'_y - U_{e_y})^2 + \xi_z'^2)}{2kT_e}} d\xi' \quad (5.24)$$

qui donne pour résultat

$$\Phi^-(|\xi'_x|) = n_e k T_e \left[ -\frac{U_{e_x}}{\sqrt{\pi} C_e} e^{-\frac{U_{e_x}^2}{C_e^2}} + \left( \frac{1}{2} + \frac{U_{e_x}^2}{C_e^2} \right) \left( 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{U_{e_x}}{C_e}\right) \right) \right]. \quad (5.25)$$

$\Phi^e(|\xi_x|)$  peut être exprimé de deux façons différentes. D'une part, puisque dans le cas d'une accommodation totale la fonction de distribution réfléchie est la Maxwellienne à la température et à la vitesse de la paroi,  $\Phi^e(|\xi_x|)$  s'exprime par

$$\Phi^e(|\xi_x|) = \frac{n^+}{(C_w \sqrt{\pi})^3} \int_{\Omega} m |\xi_x| |\xi_x| e^{-\frac{(\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2)}{C_w^2}} d\xi$$

où  $n^+$  est la densité numérique du gaz réfléchi ; ce qui donne

$$\Phi^e(|\xi_x|) = mn^+ \frac{C_w^2}{4} \quad (5.26)$$

D'autre part, on peut utiliser aussi la forme de l'opérateur correspondant à l'accommodation totale (relation (2.7)) pour exprimer la fonction de distribution réfléchie correspondant à la fonction incidente (5.16) ; le flux  $\Phi^e(|\xi_x|)$  s'écrit alors

$$\Phi^e(|\xi_x|) = \frac{mn_e}{(C_e \sqrt{\pi})^3} \int_{\Omega} |\xi_x| \int_{\Omega'} |\xi'_x| e^{-\frac{((\xi'_x - U_{e_x})^2 + (\xi'_y - U_{e_y})^2 + \xi_z'^2)}{C_e^2}} \times \frac{2}{C_w^4 \pi} \xi_x e^{-\frac{\xi_x^2}{C_w^2}} d\xi' d\xi$$

ce qui donne comme résultat

$$\Phi^e(|\xi_x|) = -\frac{mn_e}{4} C_w C_e \left[ -e^{-\frac{U_{e_x}^2}{C_e^2}} + \frac{U_{e_x}}{C_e} \sqrt{\pi} \left( 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{U_{e_x}}{C_e}\right) \right) \right] \quad (5.27)$$

En utilisant (5.19), (5.25) et (5.27), on obtient alors pour  $P_n$

$$P_n = (2 - \alpha_x) n_e k T_e \left[ -\frac{U_{e_x}}{\sqrt{\pi} C_e} e^{-\frac{U_{e_x}^2}{C_e^2}} + \left( \frac{1}{2} + \frac{U_{e_x}^2}{C_e^2} \right) \left( 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{U_{e_x}}{C_e}\right) \right) \right] + \alpha_x \frac{mn_e}{4} C_w C_e \left[ e^{-\frac{U_{e_x}^2}{C_e^2}} - \frac{U_{e_x}}{C_e} \sqrt{\pi} \left( 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{U_{e_x}}{C_e}\right) \right) \right]$$

ou encore

$$P_n = n_e k T_e \left[ \frac{\alpha_x}{2} \sqrt{\frac{T_w}{T_e}} - (2 - \alpha_x) \frac{U_{e_x}}{\sqrt{\pi} C_e} \right] e^{-\frac{U_{e_x}^2}{C_e^2}} + \quad (5.28)$$

$$n_e k T_e \left[ (2 - \alpha_x) \left( \frac{1}{2} + \frac{U_{e_x}^2}{C_e^2} \right) - \frac{\alpha_x \sqrt{\pi}}{2} \frac{U_{e_x}}{C_e} \sqrt{\frac{T_w}{T_e}} \right] \left( 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{U_{e_x}}{C_e}\right) \right)$$

Les coefficients de traînée et de portance sont définis, par les expressions

$$C_D = \frac{P_n \cos \theta_e + P_\tau \sin \theta_e}{\frac{1}{2} m n_e U_e^2 \cos \theta_e} \quad (5.29)$$

$$C_L = \frac{P_n \sin \theta_e - P_\tau \cos \theta_e}{\frac{1}{2} m n_e U_e^2 \cos \theta_e} \quad (5.30)$$

En utilisant les expressions précédentes de  $P_\tau$  et  $P_n$ , on peut alors déduire ces deux coefficients aérodynamiques. Le coefficient de traînée s'écrit,

$$C_D = \frac{C_e^2}{U_e^2} \left[ \frac{\alpha_x}{2} \sqrt{\frac{T_w}{T_e}} - (2 - \alpha_x) \frac{U_{e_x}}{\sqrt{\pi} C_e} - \alpha_y \frac{\sin \theta_e}{\cos \theta_e} \frac{U_{e_y}}{\sqrt{\pi} C_e} \right] e^{-\frac{U_{e_x}^2}{C_e^2}} +$$

$$\frac{C_e^2}{U_e^2} \left[ (2 - \alpha_x) \left( \frac{1}{2} + \frac{U_{e_x}^2}{C_e^2} \right) - \frac{\alpha_x \sqrt{\pi}}{2} \frac{U_{e_x}}{C_e} \sqrt{\frac{T_w}{T_e}} + \alpha_y \frac{U_{e_x} U_{e_y}}{C_e^2} \frac{\sin \theta_e}{\cos \theta_e} \right] \left( 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{U_{e_x}}{C_e}\right) \right)$$

ou encore, en introduisant les paramètres classiques que sont  $S_\infty = \sqrt{\frac{U_e^2}{C_e^2}}$ , et la température d'arrêt définie dans le cas d'un gaz monoatomique par la relation  $T_s = T_e \left( 1 + \frac{2S_\infty^2}{5} \right)$ ,

$$C_D = \left[ \frac{\alpha_x \sqrt{\pi}}{2S_\infty} \cos \theta_e \sqrt{\frac{T_w (1 + \frac{2S_\infty^2}{5})}{T_s}} + (2 - \alpha_x) \left( \frac{1}{2S_\infty^2} + \cos^2 \theta_e \right) + \alpha_y \sin^2 \theta_e \right] \times$$

$$(1 + \operatorname{erf}(S_\infty \cos \theta_e)) + \left[ \frac{\alpha_x}{2S_\infty^2} \sqrt{\frac{T_w (1 + \frac{2S_\infty^2}{5})}{T_s}} + (2 - \alpha_x) \frac{\cos \theta_e}{S_\infty \sqrt{\pi}} + \frac{\alpha_y}{S_\infty \sqrt{\pi}} \frac{\sin^2 \theta_e}{\cos \theta_e} \right] e^{-S_\infty^2 \cos^2 \theta_e} \quad (5.31)$$

A des altitudes comprises entre  $150\text{km}$  et  $700\text{km}$ , les observations ont montré que le rapport de la vitesse du satellite à la vitesse d'agitation thermique est plutôt élevé,  $S_\infty > 5$ . C'est pourquoi, dans les discussions sur les coefficients aérodynamiques dans ce domaine et à ces altitudes, on admet que  $S_\infty$  est généralement élevé ("Hyperthermal flow") [45]. Si l'on considère la limite  $S_\infty \rightarrow +\infty$  dans l'expression (5.31), le coefficient de traînée a alors pour expression

$$C_D = \alpha_x \cos \theta_e \sqrt{\frac{2\pi T_w}{5T_s}} + 2 [\alpha_y + (2 - \alpha_x - \alpha_y) \cos^2 \theta_e] \quad (5.32)$$

Cette expression du coefficient de traînée est celle qu'on trouve chez *Chaaf et Chambré* dans l'hypothèse de "Hyperthermal flow" [70].

On compare maintenant les valeurs théoriques de  $C_D$  données par la formule (5.31) aux résultats expérimentaux de *Bellomo et al* [106, 19] publiés en 1984. Les mesures sont effectués pour un gaz d'hélium sur une surface d'or pour un nombre de Mach égal à 14 et

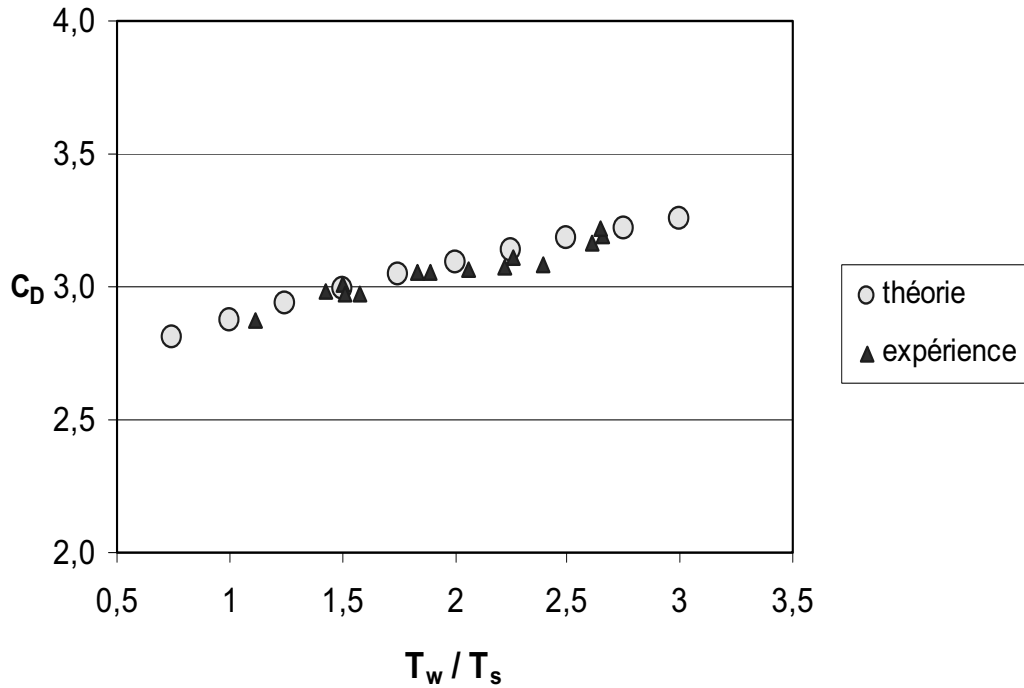


Fig. 5.6: Comparaison du  $C_D$  théorique (relation 5.31), avec  $C_D$  expérimentaux de Réf.[106] :  $\theta_e = 45^\circ$ . Pour les données expérimentales, on a  $T_s = 296^\circ K$ ,  $S_\infty = 13$ ,  $K_n = 10$ . Les points théoriques sont tracés avec  $\alpha_x = 0.65$  et  $\alpha_y = 1$

un nombre de Knudsen égal à 10. Les angles d'attaque varient de  $45^\circ$  à  $90^\circ$  et le rapport de température  $\frac{T_w}{T_s}$  étudiées, sont plutôt élevés :  $\frac{T_w}{T_s}$  varie de 0.5 à 3.

Sur la figure 5.6 sont reportées les données pour un angle d'attaque égal à  $45^\circ$ . On observe un parfait accord entre théorie et expérience ; cet accord est obtenu dans ce cas précis pour les valeurs  $\alpha_x = 0.65$  et  $\alpha_y = 1$ .

Sur la figure 5.7 sont reportées les données pour l'angle d'attaque égale à  $60^\circ$  ( $\theta_e = 30^\circ$ ). Pour cet angle, on observe encore un parfait accord entre théorie et expérience, avec une même valeur pour le coefficient d'accommodation normal et tangentiel,  $\alpha_x = \alpha_y = 0.6$ .

Sur la troisième figure 5.8, sont reportées les données pour un angle d'attaque égal à  $90^\circ$  ( $\theta_e = 0^\circ$ ). Pour cet angle, contrairement aux cas précédents, les points expérimentaux et théoriques semblent diverger même si on observe la même allure générale. La courbe théorique (la plus semblable) aux résultats expérimentaux est obtenue pour,  $\alpha_x = 1$ .  $C_D$  est indépendant de  $\alpha_y$  pour cet angle d'incidence. Il faut noter que cet angle d'attaque est en quelque sorte un angle critique pour lequel les mesures elles mêmes sont assez difficiles et donc sans doute moins précise d'autre part pour cette incidence. On peut donc globalement conclure, à partir des trois figures, 5.6, 5.7 et 5.8, que le coefficient de traînée donné par la relation théorique (5.31) est plutôt en bon accord avec ces données expérimentales.

Le concept des flux  $P_\tau$  et  $P_n$  écrits respectivement à partir d'un coefficient normal et d'un coefficient tangentiel n'est pas un concept nouveau en soi dans le domaine de la prédiction des coefficients aérodynamiques. En effet, *Schaaf et Chambré* [20], introduisant la définition d'un coefficient normal et d'un coefficient d'accommodation tangentiel, posèrent directement les flux réfléchis en fonction du flux incident sous la forme (5.17) et (5.18) puis arrivèrent à l'expression du coefficient de traînée. Cette déduction (phénoménologique) première de *Schaaf et. al*, bien qu'aboutissant aux mêmes expres-

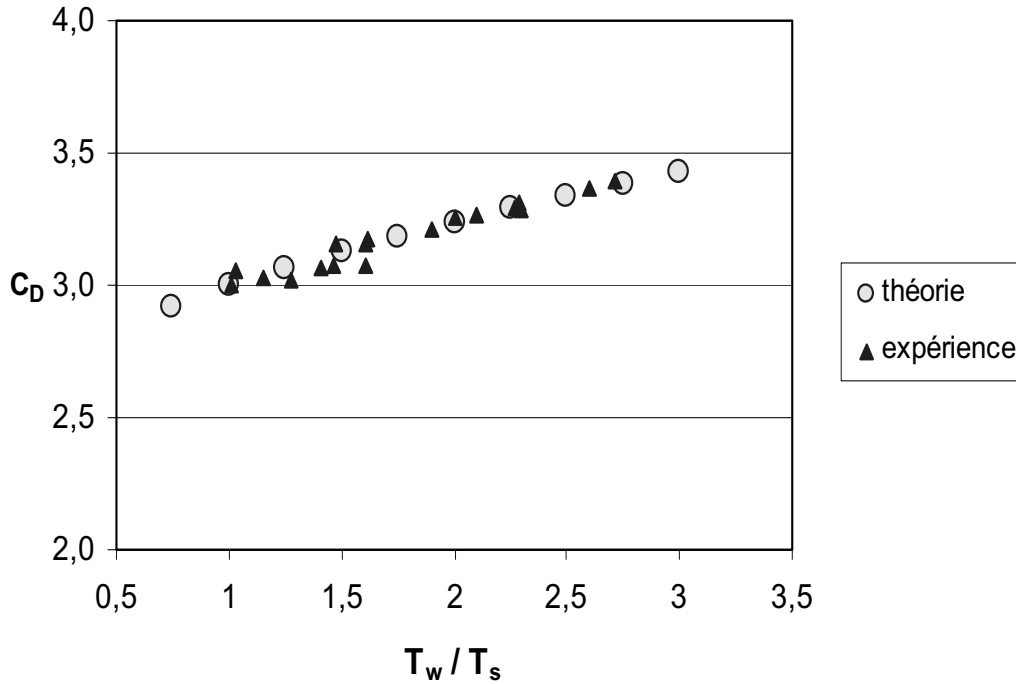


Fig. 5.7: Comparaison du  $C_D$  théorique (relation 5.31), avec  $C_D$  expérimentaux de Réf.[106],[19] :  $\theta_e = 30^\circ$ . Pour les données expérimentales, on a  $T_s = 294.65^\circ K$ ,  $S_\infty = 12.78$ ,  $Kn = 10$ . Les points théoriques sont tracés avec  $\alpha_x = 0.6$  et  $\alpha_y = 0.6$

sions formelles pour le coefficient de traînée, ne représente pas une description en terme de loi de réflexion ou de scattering Kernel. Toutefois, ce travail (*Schaaf et. al*), un peu oublié dans la littérature, a été remis au goût du jour en 1991 par *Moore et Sowter* [70] qui montrèrent que les expressions des coefficients de traînée de *Schaaf et Chambré* donnent des prédictions satisfaisantes pour les perturbations des trajectoires de satellites [70]. A travers le calcul du coefficient de traînée que nous exposons ici, il apparaît que la description concernant les flux  $P_\tau$  et  $P_n$  que donnent *Schaaf et Chambré*, à partir d'une simple introduction d'un coefficient tangentiel et d'un coefficient normal, est bien compatible avec la théorie du scattering kernel et que l'opérateur de réflexion qui lui correspond est bien celui décrit au chapitre 2. Dans leurs travaux, *Schaaf et. al* utilisent aussi un troisième coefficient d'accommodation qui est le coefficient d'accommodation de l'énergie pour le calcul du coefficient de flux de chaleur. Mais, ici, nous disposons d'un opérateur de réflexion qui permet la description de la réflexion du mode de translation à l'aide des seuls coefficients d'accommodation normal et tangentiel de la quantité de mouvement. Pour les molécules monoatomiques, on peut alors calculer explicitement le flux de chaleur réfléchi et en déduire le coefficient de flux de chaleur. Ceci permettra une réelle comparaison du coefficient d'accommodation d'énergie théorique avec le coefficient d'accommodation expérimental déduit des mesures de flux chaleur.

### 5.3.2 Dépendance des coefficients d'accommodation par rapport à l'angle d'attaque

Les coefficients d'accommodations sont des paramètres liés aux propriétés du couple gaz/paroi. Ces coefficients ne dépendent pas des paramètres microscopiques du gaz, mais

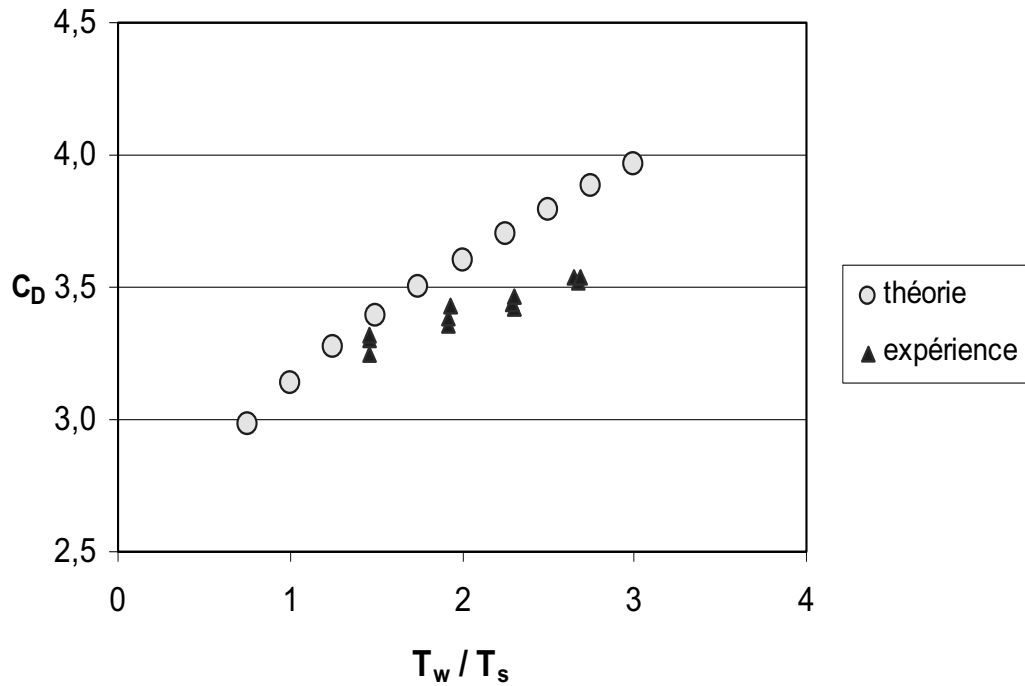


Fig. 5.8: Comparaison du  $C_D$  théorique (relation 5.31), avec  $C_D$  expérimentaux de Réf.[106] :  $\theta_e = 0^\circ$ . Pour les données expérimentales, on a  $T_s = 294.65^\circ K$ ,  $S_\infty = 13$ ,  $K_n = 10$ . Les points théoriques sont tracés avec  $\alpha_x = 1$

en revanche ils peuvent dépendre des paramètres macroscopiques tels que la vitesse macroscopique du flux incident. Dans la modélisation où l'on considère que le gaz qui arrive sur la paroi est décrit par une distribution Maxwellienne à la vitesse  $U_e$ , l'angle d'incidence  $\theta_e$  peut être considéré comme un paramètre macroscopique. A ce titre, les coefficients  $\alpha_x$  et  $\alpha_y$  peuvent, d'un point de vue théorique, dépendre de l'angle  $\theta_e$ . Mais il faut noter que cela n'est pas vrai dans le cas où l'on considère un flux monochromatique du à une distribution des particules décrite par un Dirac : dans un tel cas, l'angle d'attaque serait un paramètre microscopique directement lié à la vitesse d'une particule propre, sans liens physiques évidents avec les coefficients  $\alpha_x$  et  $\alpha_y$  du kernel.

Sur les figures 5.6, 5.7 et 5.8 le "meilleur accord" entre la théorie et l'expérience est obtenu pour des valeurs des coefficients d'accommodation qui varient suivant l'angle  $\theta_e$ . On remarque que lorsque l'angle d'attaque tend vers  $90^\circ$  il semble que le coefficient d'accommodation normal  $\alpha_x$  tende vers 1 alors que le coefficient tangentiel devient très faible. On obtient les variations inverses lorsque l'angle d'attaque tend vers  $45^\circ$ , tandis que les deux coefficients sont égaux pour un angle d'attaque intermédiaire égal à  $60^\circ$ . En somme l'angle d'attaque égal à  $90^\circ$  correspondrait à l'angle d'attaque où la composante normale de la quantité de mouvement subirait une accommodation totale tandis que la composante tangentielle n'échangerait rien. L'angle correspondant à l'échange maximal de quantité de mouvement tangentielle est l'angle d'attaque égal à  $45^\circ$ .

## 5.4 conclusion

L'étude d'un écoulement de Couette en régime de glissement de vitesse a permis de montrer que les descriptions de profils de vitesses dans ce régime dépend assez sensiblement

des conditions aux limites cinétiques. Les phénomènes d'inversion de profils de vitesse récemment évoqués théoriquement dans la littérature pour ces régimes semblent dus à une modélisation inadéquate des conditions aux limites cinétiques. Les opérateurs construits aux chapitre précédents ne conduisent pas à de telles inversions de profils mais à des profils plus classiques.

Dans la deuxième partie du chapitre, traitant des coefficients aérodynamiques pour les satellites artificiels en orbite , on a constaté que la description des flux incidents et réfléchis à l'aide d'un coefficient d'accommodation normal et tangentiel, introduite par *Schaaf et Chambré*, est bien compatible avec la théorie de scattering kernel : la loi de réflexion correspondant à cette description est celle écrite au chapitre 2. Les résultats concernant le coefficient de traînée obtenu à partir de cette description sont plutôt en bon accord avec les résultats expérimentaux pour des angles d'attaque supérieurs à  $45^\circ$ .



# Conclusions générales et perspectives

Tout au long de ce travail, nous avons traité des problèmes de l'interaction gaz/paroi et des conditions aux limites en écoulement de gaz raréfiés. Nous avons ainsi élaboré une construction de modèles de conditions aux limites cinétiques et nous avons développé une approche simplifiée de la discontinuité pariétale des paramètres macroscopiques. Dans la première partie de ces conclusions générales on rappelle les résultats obtenus dans ce travail, puis on présente d'autres cheminements possibles pour aborder ces problèmes en cernant mieux les aspects qui n'ont pas été traités au fond dans le manuscrit.

D'après les observations expérimentales et leurs comparaisons avec les résultats fournis par les modèles classiques, l'utilisation de plusieurs coefficients d'accommodation semblait nécessaire pour une description réaliste et pertinente de l'interaction gaz/paroi. Dans les chapitres 1 et 2, nous avons mis au point une méthode systématique pour construire des opérateurs de réflexion correspondant à une description phénoménologique simple et complète en terme d'accommodation. Développant ainsi la théorie du scattering kernel à partir d'une formulation intégrale et de descriptions spectrales, nous avons trouvé une méthode de construction de lois de réflexion à la paroi compatible avec l'accommodation propre de chaque propriété cinétique. On a abouti à un modèle simple et maniable qui décrit les différentes possibilités d'accommodation, aussi bien pour les gaz monoatomiques que pour les gaz polyatomiques. Ainsi, pour les molécules monoatomiques, les lois de réflexions s'expriment à l'aide de trois coefficients d'accommodation correspondant aux trois degrés de liberté d'une particule simple en collision avec la paroi. La présence de trois coefficients directionnels permet ici de rendre compte d'un éventuel caractère anisotrope de la surface de réflexion (à travers la présence de deux coefficients tangentiels différents). Et dans tous les cas le modèle s'adapte parfaitement à un éventuel caractère tridimensionnel de l'écoulement. Dans l'extension qui est proposée ensuite pour les gaz polyatomiques, la méthode de construction s'élargit tout naturellement aux degrés de liberté internes du gaz : les coefficients d'accommodation des différentes énergies internes sont introduits à leur tour et finalement le nombre de paramètres intervenant dans l'écriture de la loi de réflexion dépend du nombre de degrés de liberté (et éventuellement du nombre de modes de chaque degré de liberté interne) des molécules considérées.

Le deuxième grand thème développé dans ce mémoire, est celui des discontinuités pariétales dans le régime dit des écoulements glissants ( $0.001 < K_n < 0.2$ ), où l'accent a été mis surtout sur l'influence de la modélisation de l'interaction gaz/paroi elle-même. Les problèmes de discontinuité ont été traités comme des "conditions aux limites réelles de l'écoulement" : les paramètres macroscopiques du gaz au contact de la paroi ont été établis, à partir d'un bilan de flux de chaleur, pour ce qui est du saut de température, et par un calcul direct à la paroi en ce qui concerne la vitesse macroscopique de glissement. Les calculs ont été explicités à l'aide d'une fonction incidente de Chapman Enskog ; ce choix entraîne

évidemment quelques limitations sur la validité de nos résultats, et l'on reviendra sur ce problème dans la deuxième partie de ces conclusions et perspectives. Il reste que de toute façon, les résultats ainsi obtenus présentent un certain nombre d'avantages par rapport aux résultats plus anciens :

1. tous les effets physiques pouvant se développer à la paroi sont ici représentés ; notamment les effets de viscosité, de compressibilité ou encore d'anisotropie de la surface.
2. la démarche permet aussi d'établir des conditions aux limites du continuum incluant tous les coefficients d'accommodation et cela sans faire appel à une évaluation contestable de la contrainte à la paroi.
3. enfin il faut ajouter que la méthode de calcul proposée peut être reprise avec une fonction incidente plus réaliste que celle utilisée pour l'instant.

Dans ce domaine des conditions limites hydrodynamiques, nous avons d'ailleurs étendu notre expression du saut de température au cas des molécules polyatomiques pour lesquelles on constate que les effets visqueux jouent un plus grand rôle. En effet, la relation de saut de température contient alors des termes de dilatation ou de compression volumique venant de l'excitation des modes internes. Compte tenu de la forte variation des gradients (notamment du gradient de densité volumique) qui se produit dans la couche de Knudsen, ces termes, qui sont des effets de la viscosité de volume, apportent au flux de chaleur une contribution qui ne peut être ignorée.

Après avoir constaté que le modèle semblait apporter des réponses dans des cas limites où les modèles classiques donnent des réponses inappropriées (réflexion complètement spéculaire par exemple), nous avons consacré la dernière partie du travail à l'étude de quelques problèmes spécifiques pour lesquels les lois de réflexion et les conditions de glissement établies ont été mises en application. Comme on le sait, en microfluidique, l'utilisation de mauvaises conditions aux limites peuvent conduire à de mauvais profils de l'écoulement (i.e. l'écoulement extérieur à la couche de Knudsen.) On a vérifié d'abord que les coefficients de glissement théoriques déduits de l'expression de la vitesse de glissement établie lors de nos études, sont en bonne adéquation avec les mesures. On s'est intéressé ensuite à un problème récent d'anomalie de profil signalé dans la littérature et qui est lié à l'expression du coefficient de glissement : il s'agit du problème de l'inversion de profil de vitesse dans un écoulement de Couette cylindrique de quelques libres parcours moyens d'épaisseur. Nous avons pu observer que les dites inversions pourraient bien être dues à l'inadéquation des modèles utilisés pour décrire l'interaction gaz/paroi.

L'autre problème spécifique que l'on a étudié est celui de la prédiction des coefficients de traînée relatifs aux satellites en régime d'écoulement libre sur une orbite autour de la terre. Dans ce régime d'écoulement, des calculs analytiques complets ont permis d'exprimer directement le coefficient aérodynamique à l'aide des coefficients d'accommodation. Dans les cas qui ont été étudiés, les coefficients de traînée théoriques issus de la présente loi de réflexion donnent des résultats satisfaisants quand on les compare avec les données expérimentales.

Il reste dans ce domaine à faire subir à nos résultats théoriques quelques tests complémentaires (qui n'ont pas encore été effectués pour des raisons de temps) : une comparaison théorie/expérience pour le flux de chaleur en régime d'écoulement libre, ainsi qu'une comparaison théorie/expérience dans le cadre des "molecular beam" sont en cours de réalisation. Ces études complémentaires

nous permettront de mieux situer nos modèles de description d'interaction gaz/paroi par rapport aux autres modèles théoriques existants, notamment les modèles CL et CLL.

Pour établir les relations de discontinuité, nous avons utilisé une distribution de type Navier Stokes ; comme on l'a vu, ce choix particulier se heurte à la question de la validité d'une distribution de ce type à travers la couche de Knudsen, même s'il ne concerne que la distribution des particules incidentes. Pour l'heure, un type de correction (assez grossière) de ces relations a été proposé sur la base des propriétés de la couche de Knudsen pour prendre en compte notamment la variation sensible des gradients dans la couche. Mais cette question de validité de la distribution de type Navier Stokes (ou de l'utilisation d'un autre modèle), est un problème fondamental qui reste à régler pour décrire les phénomènes de transport dans la couche de Knudsen ou plus largement encore pour décrire le régime de transition.

Le problème de la couche de Knudsen, ou plus généralement le problème d'un écoulement sous influence directe des effets de paroi, demeure un sujet important pour la prédiction des écoulements en hautes altitudes ou dans la prédiction des effets de parois. La région au voisinage immédiat de la paroi, lorsqu'on la distingue de l'écoulement extérieur, peut être caractérisée dans certains cas comme une zone de fort déséquilibre et l'état de déséquilibre doit être alors associé à la présence d'une paroi se trouvant dans un état thermodynamique éloigné de celui du gaz. Dans ces conditions, un état d'équilibre local ne peut plus être assuré puisque l'équilibre local auquel devrait conduire les paramètres macroscopiques locaux du gaz, interfère avec l'équilibre auquel devrait conduire les paramètres thermodynamiques de la paroi. Ainsi se trouve remise en question la validité des formes classiques de modélisation de l'équation de Boltzmann, notamment les relations de fermetures des équations de transport, en écoulement faiblement perturbé par rapport à un état thermodynamique, que représentent la loi de Fourier pour le flux de chaleur et la loi de Newton pour la contrainte. D'ailleurs les modèles cinétiques classiques tels que le développement de Chapman ou encore l'utilisation des polynômes d'Hermite chez Grad, sont soumis à l'existence d'une distribution d'équilibre local qui coïncide avec la solution d'ordre zéro du développement. Dans cette solution d'ordre zéro qui est généralement une Maxwellienne, les paramètres macroscopiques qui interviennent sont égaux aux paramètres macroscopiques réels locaux du gaz (ou en sont très proches). De plus, cette distribution locale reste une distribution proche de la répartition réelle des particules. Enfin, du point de vue de la théorie cinétique, l'existence d'une telle distribution d'équilibre local suppose qu'il y ait eu un nombre de collisions suffisant pour permettre une homogénéisation, au moins locale de la répartition énergétique des particules.

Compte tenu de l'épaisseur de la couche de Knudsen, il est évident que les collisions peuvent être insuffisantes pour assurer une homogénéisation conduisant à un état d'équilibre local. Ainsi les conditions générales qui permettraient l'utilisation pertinentes des modèles "classiques" de résolution de l'équation de Boltzmann ne sont pas réellement satisfaites dans le domaine de la couche Knudsen (à moins d'avoir recours à l'hypothèse d'un état thermodynamique de la paroi qui serait proche de celui du gaz et de ce fait ne pourrait le perturber radicalement.) Il apparaît donc qu'un modèle cinétique destiné à la description de la couche de Knudsen, devra pouvoir s'adapter à ces conditions particulières et rendre compte d'une physique où les collisions sont peu nombreuses. D'un "point" de vue purement statistique cela suppose que, dans la couche de Knudsen, la répartition énergétique

des particules ne peut plus être décrite par une seule distribution centrée autour d'un seul point, comme c'était le cas pour les répartitions quasi uniformes.

*Mott-Smith* [47] a introduit le premier une distribution bimodale (au sens statistique), dans le cadre de la description des épaisseurs d'ondes de choc. Il suppose que, d'un point de vue cinétique, l'intérieur de l'onde de choc (dont l'épaisseur ne mesure que quelques libres parcours moyens), est une zone de surperposition des deux distributions régnant à l'amont et à l'aval de l'onde de choc. Ce modèle cinétique conduit à de bien meilleurs résultats que ne le font les descriptions classiques. Les équations de conservation macroscopiques qui découlent de cette description cinétique sont une forme généralisée des relations de saut bien connues de Rankine-Hugoniot. Ce type de description paraît bien adapté à la situation à laquelle on est confronté dans la couche de Knudsen. Il faut évidemment effectuer ici quelques transpositions : il faut d'abord prendre en compte le fait que l'un des milieux délimitant "la zone de déséquilibre", est une paroi solide. Ensuite doit-on sans doute adopter l'idée qu'il existe en chaque point de la couche de Knudsen des molécules dans des états d'excitation perturbés par la paroi et d'autres dans des états analogues à celui des molécules de l'écoulement extérieur.

Une tentative a été faite par *Lee* [17, 58, 59] pour utiliser une approche bimodale dans le traitement de certains problèmes de théorie cinétique des gaz. En fait, l'auteur s'écarte de la méthode initiale et n'a pas recours à une véritable superposition de plusieurs distributions modales, mais plutôt à l'utilisation alternative de l'une ou de l'autre de ces fonctions suivant la région de l'écoulement qu'il considère : il n'y a donc plus de modélisation possible des collisions entre particules appartenant à des distributions modales différentes.

Le travail essentiel auquel on se trouve confronté dans l'application de la méthode bimodale à la couche de Knudsen est la modélisation de l'interaction entre particules venant de fonctions modales différentes. Cet aspect de la question rappelle en réalité le traitement de la partie quadratique de l'opérateur intégral de l'équation de Boltzmann. En ce qui concerne les conditions aux limites cinétiques, on peut les intégrer dans la description de la couche de Knudsen de deux façons : soit en les introduisant par le biais des bilans de flux à la paroi, sur la base des calculs faits sur les coefficients d'accommodation dans les premiers chapitres de cette thèse, soit en les utilisant directement comme conditions de passage appliquées à une distribution incidente à la paroi.

Pour donner une idée plus concrète de la méthode que l'on pourrait développer, on peut faire observer que la forme de solution envisagée pour la couche de Knudsen peut être encore rapprochée formellement de la décomposition proposée par *Kogan* sous la forme

$$f = f_{NS} + f_{\mu} = F^0(1 + \phi_{NS}) + f_{\mu}$$

où  $f_{NS}$  est une solution de forme Navier Stokes et  $F^0$  la Maxwellienne locale. Mais contrairement à ce qui se fait habituellement,  $f_{\mu}$  devrait être traitée ici réellement comme une "distribution complémentaire" due à la présence de la paroi, et non comme une perturbation complémentaire de la Maxwellienne  $F^0$  qui s'écrit, chez *Kogan*  $f_{\mu} = F^0\phi_{KL}$ . La fonction  $f_{\mu}$  pourrait être proche de l'état de la paroi et être déterminée à l'aide de la loi de réflexion.

Les approches de la couche de Knudsen qu'on rencontre pour l'instant le plus fréquemment dans la littérature s'appuient sur les hypothèses proposées par *Welanders* à savoir :

- d’importantes variations des gradients
- de faibles variations relatives des grandeurs macroscopiques
- et une vitesse macroscopique nulle

Mais à moins d’avoir recours à des hypothèses peu vraisemblables, les discontinuités pariétales importantes (rencontrées en recherche aérospatiale) entraînent l’existence de gradients parfois très importants. Or, comme le fait remarquer *Cercignani* [10], le domaine des forts gradients est hors de portée de l’équation de Boltzmann linéarisée et plus généralement des modèles cinétiques classiques. Les carences soulignées dans les approches classiques de la couche de Knudsen renvoient aussi au manque de connaissance de solution satisfaisante pour l’équation de Boltzmann au voisinage de la paroi. A notre avis la recherche d’une solution satisfaisante ne peut se réduire ici à la recherche de solution d’ordre supérieur en terme de perturbation mais doit passer par une autre forme de modèle cinétique impliquant directement le rôle primordial de la paroi, modèle en direction duquel nous nous sommes efforcés d’indiquer quelques pistes.

# Annexes

On rappelle l'expression d'une distribution Maxwellienne,

$$F^0(V') = \frac{n}{(C\sqrt{\pi})^3} e^{-\frac{V'^2}{C^2}}$$

avec  $C^2 = \frac{2kT}{m}$ . En  $x = 0$ , la composante normale de la vitesse moyenne  $U_x$  du gaz est égale à zéro et on a  $V' \in \Omega' = ]-\infty; 0[ \times ]-\infty; +\infty[ \times ]-\infty; +\infty[$ .

## Résultats de calcul d'intégrales fréquemment utilisés

$$\begin{aligned} \int_0^{+\infty} e^{-\frac{t^2}{C^2}} dt &= \frac{C\sqrt{\pi}}{2} \quad , \quad \int_0^{+\infty} t e^{-\frac{t^2}{C^2}} dt = \frac{C^2}{2} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} t^2 e^{-\frac{t^2}{C^2}} dt &= \frac{C^3\sqrt{\pi}}{2} \quad , \quad \int_0^{+\infty} t^3 e^{-\frac{t^2}{C^2}} dt = \frac{C^4}{2} \end{aligned}$$

Dans le cadre des calculs du coefficient de traînée en régime d'écoulement libre, où la vitesse moyenne du gaz incident n'est pas nulle à la paroi (chapitre 5), les résultats d'intégrales souvent utilisés sont :

$$\int_{-U_{e_x}}^{+\infty} e^{-\frac{t^2}{C^2}} dt = \frac{C\sqrt{\pi}}{2} \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{U_{e_x}}{C}\right)\right) \quad , \quad \int_{U_{e_x}}^{+\infty} e^{-\frac{t^2}{C^2}} dt = \frac{C\sqrt{\pi}}{2} \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{U_{e_x}}{C}\right)\right)$$

$$\int_{-U_{e_x}}^{+\infty} t^2 e^{-\frac{t^2}{C^2}} dt = -\frac{C^2}{2} U_{e_x} e^{-\frac{U_{e_x}^2}{C^2}} + \frac{C^3\sqrt{\pi}}{4} \left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{U_{e_x}}{C}\right)\right) \quad ,$$

$$\int_{U_{e_x}}^{+\infty} t^2 e^{-\frac{t^2}{C^2}} dt = \frac{C^2}{2} U_{e_x} e^{-\frac{U_{e_x}^2}{C^2}} + \frac{C^3\sqrt{\pi}}{4} \left(1 - \operatorname{erf}\left(\frac{U_{e_x}}{C}\right)\right) \quad ,$$

$$\int_{-U_{e_x}}^{+\infty} t e^{-\frac{t^2}{C^2}} dt = \int_{U_{e_x}}^{+\infty} t e^{-\frac{t^2}{C^2}} dt = \frac{C^2}{2} e^{-\frac{U_{e_x}^2}{C^2}} \quad ,$$

$$\int_{U_{e_x}}^{+\infty} t^3 e^{-\frac{t^2}{C^2}} dt = \frac{C^4}{2} \left(1 + \frac{U_{e_x}^2}{C^2}\right) e^{-\frac{U_{e_x}^2}{C^2}} \quad ,$$

où  $\operatorname{erf}$  est la fonction erreur définie par

$$\operatorname{erf}(a) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^a e^{-t^2} dt$$

**Calcul de  $\int_{\Omega} V^2 \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi$  et de  $\int_{\Omega} V^2 \mathcal{B}_{diff} d\xi$  , calcul de  $\int_{\Omega} \frac{\xi_y}{\xi_x} \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi$**

L'opérateur de réflexion construit au chapitre 2 peut s'écrire sous la forme factorisée suivante,

$$\mathcal{B}(\xi', \xi) = P_x P_y P_z$$

où les facteurs  $P_x, P_y, P_z$  sont ceux de la relation (3.15). Ces facteurs vérifient

$$\int_0^{+\infty} P_x d\xi_x = \int_{-\infty}^{+\infty} P_y d\xi_y = \int_{-\infty}^{+\infty} P_z d\xi_z = 1 . \quad (33)$$

**calcul de  $\int_{\Omega} V^2 \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi$**

En tenant compte du fait que  $U_x$  est égale à zéro en  $x = 0$ , on a

$$V^2 = (\xi - U)^2 = \xi^2 - 2\xi_y U_y - 2\xi_z U_z + U^2 ;$$

ce qui permet d'écrire

$$\int_{\Omega} V^2 \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi = \int_{\Omega} \xi^2 \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi - 2U_y \int_{\Omega} \xi_y \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi - 2U_z \int_{\Omega} \xi_z \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi + U^2 .$$

Calculons séparément chacune de ces intégrales :

- **calcul de  $\int_{\Omega} \xi^2 \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi$**

$$\int_{\Omega} \xi^2 \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi = \int_{\Omega} (\xi_x^2 + \xi_y^2 + \xi_z^2) P_x P_y P_z d\xi$$

En utilisant les propriétés (33) on obtient,

$$\int_{\Omega} \xi^2 \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi = \int_0^{+\infty} \xi_x^2 P_x d\xi_x + \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_y^2 P_y d\xi_y + \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_z^2 P_z d\xi_z ;$$

ce qui donne après calcul

$$(1 - \alpha_x) \xi_x'^2 + (1 - \alpha_y) \xi_y'^2 + (1 - \alpha_z) \xi_z'^2 + \frac{2\alpha_x}{C_w^2} \int_0^{+\infty} \xi_x^3 e^{-\frac{\xi_x^2}{C_w^2}} d\xi_x + \frac{\alpha_y}{C_w \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_y^2 e^{-\frac{\xi_y^2}{C_w^2}} d\xi_y + \frac{\alpha_z}{C_w \sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_z^2 e^{-\frac{\xi_z^2}{C_w^2}} d\xi_z .$$

On trouve finalement le résultat suivant

$$\int_{\Omega} \xi^2 \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi = \xi'^2 - \alpha_x \xi_x'^2 - \alpha_y \xi_y'^2 - \alpha_z \xi_z'^2 + \sigma_0 C_w^2$$

avec  $\sigma_0 = \alpha_x + \frac{1}{2}(\alpha_y + \alpha_z)$

- calcul de  $\int_{\Omega} \xi_y \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi$  et de  $\int_{\Omega} \xi_z \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi$

A l'aide des propriétés (33) on a

$$\int_{\Omega} \xi_y \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi = \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_y P_y d\xi_y .$$

En utilisant ensuite l'expression de  $P_y$  (page 46), on obtient aisément

$$\int_{\Omega} \xi_y \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi = (1 - \alpha_y) \xi'_y .$$

De la même façon on obtient

$$\int_{\Omega} \xi_z \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi = (1 - \alpha_z) \xi'_z .$$

On peut finalement écrire

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} V^2 \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi &= \xi'^2 - \alpha_x \xi_x'^2 - \alpha_y \xi_y'^2 - \alpha_z \xi_z'^2 + \sigma_0 C_w^2 \\ &\quad - 2U_y (1 - \alpha_y) \xi'_y - 2U_z (1 - \alpha_z) \xi'_z + U^2 . \end{aligned}$$

En utilisant à nouveau le changement de variable  $\xi' = V' + U$ , on trouve comme résultat

$$\int_{\Omega} V^2 \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi = V'^2 - \alpha_x V_x'^2 - \alpha_y V_y'^2 - \alpha_z V_z'^2 + \sigma_0 C_w^2 + \alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2 . \quad (34)$$

Puisque l'opérateur de réflexion d'accommodation parfaite  $\mathcal{B}_{dif}(\xi', \xi)$ , se déduit de l'opérateur  $\mathcal{B}(\xi', \xi)$  en y prenant tous les coefficients d'accommodation égaux à 1, on peut déduire de (34), le résultat suivant,

$$\int_{\Omega} V^2 \mathcal{B}_{dif}(\xi', \xi) d\xi = 2C_w^2 + U^2 . \quad (35)$$

**calcul de**  $\int_{\Omega} \frac{\xi_y}{\xi_x} \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi$

On a

$$\int_{\Omega} \frac{\xi_y}{\xi_x} \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi = \int_0^{+\infty} \frac{1}{\xi_x} P_x d\xi_x \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_y P_y d\xi_y \int_{-\infty}^{+\infty} P_z d\xi_z .$$

En exprimant  $P_x$ ,  $P_y$ , et de  $P_z$  (Cf. page 46), on obtient

$$\int_{\Omega} \frac{\xi_y}{\xi_x} \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi = \alpha_x (1 - \alpha_y) \frac{\sqrt{\pi}}{C_w} \xi'_y - (1 - \alpha_x) (1 - \alpha_y) \frac{\xi'_y}{\xi'_x}$$



**Table d'intégrales de  $F^0(V')$ , utilisées dans les sections suivantes**

$\int_{\Omega'}  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC}{2\sqrt{\pi}}$	$\int_{\Omega'} V'^2_x  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^3}{2\sqrt{\pi}}$
$\int_{\Omega'} V'^2_y  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^3}{4\sqrt{\pi}}$	$\int_{\Omega'} V'^2_z  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^3}{4\sqrt{\pi}}$
$\int_{\Omega'} V'_x  V'_x  F^0(V')$	$= -\frac{nC^2}{4}$	$\int_{\Omega'} V'^3_x  V'_x  F^0(V')$	$= -\frac{3nC^4}{8}$
$\int_{\Omega'} V'_x V'^2_y  V'_x  F^0(V')$	$= -\frac{nC^4}{8}$	$\int_{\Omega'} V'_x V'^2_z  V'_x  F^0(V')$	$= -\frac{nC^4}{8}$
$\int_{\Omega'} V'_x V'^2  V'_x  F^0(V')$	$= -\frac{5nC^4}{8}$	$\int_{\Omega'} V'^3_x V'^2  V'_x  F^0(V')$	$= -\frac{21nC^6}{16}$
$\int_{\Omega'} V'_x V'^2_y V'^2  V'_x  F^0(V')$	$= -\frac{7nC^6}{16}$	$\int_{\Omega'} V'_x V'^2_z V'^2  V'_x  F^0(V')$	$= -\frac{7nC^6}{16}$
$\int_{\Omega'} V'^2_x  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^3}{2\sqrt{\pi}}$	$\int_{\Omega'} V'^4_x  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^5}{\sqrt{\pi}}$
$\int_{\Omega'} V'^2_x V'^2_y  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^5}{4\sqrt{\pi}}$	$\int_{\Omega'} V'^2_x V'^2_z  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^5}{4\sqrt{\pi}}$
$\int_{\Omega'} V'^2_y  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^3}{4\sqrt{\pi}}$	$\int_{\Omega'} V'^2_y V'^2_x  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^5}{4\sqrt{\pi}}$
$\int_{\Omega'} V'^4_y  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{3nC^5}{8\sqrt{\pi}}$	$\int_{\Omega'} V'^2_y V'^2_z  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^5}{8\sqrt{\pi}}$
$\int_{\Omega'} V'^2_z  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^3}{4\sqrt{\pi}}$	$\int_{\Omega'} V'^2_z V'^2_x  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^5}{4\sqrt{\pi}}$
$\int_{\Omega'} V'^2_z V'^2_y  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^5}{8\sqrt{\pi}}$	$\int_{\Omega'} V'^4_z  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{3nC^5}{8\sqrt{\pi}}$
$\int_{\Omega'} V'^2  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{nC^3}{\sqrt{\pi}}$	$\int_{\Omega'} V'^2 V'^2_x  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{3nC^5}{4\sqrt{\pi}}$
$\int_{\Omega'} V'^2 V'^2_y  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{3nC^5}{4\sqrt{\pi}}$	$\int_{\Omega'} V'^2 V'^2_z  V'_x  F^0(V')$	$= \frac{3nC^5}{4\sqrt{\pi}}$

**calcul de  $Q_{0M}$**

On a,

$$Q_{0M} = \frac{1}{2} m \int_{\Omega'} \left[ (\alpha_x V'^2_x + \alpha_y V'^2_y + \alpha_z V'^2_z) - \sigma_0 C_w^2 - \alpha_y U_y^2 - \alpha_z U_z^2 \right] |V'_x| F^0(V') dV'$$

Utilisant les premiers éléments de la table d'intégrales, on trouve

$$Q_{0M} = \frac{mnC_0\sigma_0}{4\sqrt{\pi}} (C_0^2 - C_w^2) - \frac{mnC_0}{4\sqrt{\pi}} (\alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2)$$

**calcul de  $(\Phi^-(V^2) - \Phi^+(V^2))$  et de  $(\Phi^-(V^2) - \Phi^e(V^2))$**

On a

$$\Phi^-(V^2) = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m |\xi'_x| V^2 f^-(\xi', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) d\xi',$$

$$\Phi^+(V^2) = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m |\xi'_x| f^-(\xi', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}) \left[ \int_{\Omega} V^2 P_x P_y P_z d\xi \right] d\xi',$$

et

$$\Phi^e(V^2) = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m | \xi'_x | f^-(\xi', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}) \left[ \int_{\Omega} V^2 B_{dif} d\xi \right] d\xi'$$

Dans le cas où la distribution incidente est une distribution de Maxwell-Boltzmann (avec  $U = 0$ , i.e pas de mouvement macroscopique du gaz par rapport à la paroi), ces expressions se réduisent et deviennent

$$\Phi^-(V^2) = \int_{\Omega'} m |V'_x| V'^2 F^0(V') dV' ,$$

$$\Phi^+(V^2) = \int_{\Omega'} m |V'_x| F^0(V') \left[ \int_{\Omega} V^2 \mathcal{B}(\xi', \xi) d\xi \right] d\xi' ,$$

et

$$\Phi^e(V^2) = \int_{\Omega'} m |V'_x| F^0(V') \left[ \int_{\Omega} V^2 \mathcal{B}_{dif} d\xi \right] d\xi' .$$

A partir des relations (34) et (35) on peut réécrire ces expressions. Il vient

$$\Phi^-(V^2) - \Phi^+(V^2) = \int_{\Omega'} m |V'_x| F^0(V') \left[ \alpha_x V_x'^2 + \alpha_y V_y'^2 + \alpha_z V_z'^2 - \sigma_0 C_w^2 \right] dV'$$

et

$$\Phi^-(V^2) - \Phi^e(V^2) = \int_{\Omega'} m |V'_x| V'^2 F^0(V') dV' - 2C_w^2 \int_{\Omega'} m |V'_x| F^0(V') dV'$$

En utilisant la table d'intégrale on trouve finalement,

$$\Phi^-(V^2) - \Phi^+(V^2) = \frac{mnC\sigma_0}{2\sqrt{\pi}} (C^2 - C_w^2)$$

et

$$\Phi^-(V^2) - \Phi^e(V^2) = \frac{mnC}{\sqrt{\pi}} (C^2 - C_w^2)$$

### calcul de $Q_{0\varphi}$

On a

$$Q_{0\varphi} = -\frac{1}{2} m \int_{\Omega'} \left[ \chi_\sigma - \left( \alpha_x V_x'^2 + \alpha_y V_y'^2 + \alpha_z V_z'^2 \right) \right] |V'_x| F^0(V') \varphi(V') dV' \quad (36)$$

où on a noté  $\chi_\sigma = \sigma_0 C_w^2 + \alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2$ .

Écrivons l'expression de  $\varphi(V')$ , de la page 55, sous la forme,

$$\begin{aligned} \varphi(V') &= \frac{2\lambda_c}{nkTC^2} \nabla T \cdot V' - \frac{4\lambda_c}{5nkTC^4} V'^2 \nabla T \cdot V' \\ &+ \frac{2\mu}{nkTC^2} (V_i' V_j') : \left( \frac{\partial U_i}{\partial X_j} \right) - \frac{2\mu}{3nkTC^2} V'^2 \nabla \cdot U \end{aligned} \quad (37)$$

Sur chacune des quatre parties de cette expression de  $\varphi(V')$ , on peut répertorier les termes qui, pour des raisons de parité, conduisent à une intégrale nulle, dans le calcul de  $Q_{0\varphi}$ . Ainsi

dans cette expression de  $\varphi(V')$ , les termes en  $\frac{\partial T}{\partial y}V'_y$  et  $\frac{\partial T}{\partial z}V'_z$ , conduisent à des intégrales nulles puisque liées à une fonction impaire sur  $V'_y$  ou impaire sur  $V'_z$ . Par suite, dans le second membre de (36), les fonctions dont les intégrales ne sont pas nulles, sont les fonctions qui proviennent des termes suivants de  $\varphi(V')$  :

$$\frac{\partial T}{\partial x}V'_x ; \quad \frac{\partial T}{\partial x}V'_xV'^2 ; \quad V'_x\frac{\partial U_x}{\partial x} ; \quad V'^2_y\frac{\partial U_y}{\partial y} ; \quad V'^2_z\frac{\partial U_z}{\partial z} ; \quad \text{et} \quad V'^2\nabla.U \quad (38)$$

En utilisant la table des intégrales, en suivant l'ordre dans lequel les quatre parties de l'expression de  $\varphi(V')$  apparaissent dans la relation (37), il vient

$$\begin{aligned} Q_{0\varphi} = & -\frac{m\lambda_c}{nkTC^2}\frac{\partial T}{\partial x}\left[-\chi_\sigma\frac{nC^2}{4} + \alpha_x\frac{3nC^4}{8} + \alpha_y\frac{nC^4}{8} + \alpha_z\frac{nC^4}{8}\right] \\ & +\frac{2m\lambda_c}{5nkTC^4}\frac{\partial T}{\partial x}\left[-\chi_\sigma\frac{5nC^4}{8} + \alpha_x\frac{21nC^6}{16} + \alpha_y\frac{7nC^6}{16} + \alpha_z\frac{7nC^6}{16}\right] \\ & -\frac{m\mu}{nkTC^2}\left[\frac{\partial U_x}{\partial x}\left(\chi_\sigma\frac{nC^3}{2\sqrt{\pi}} - \alpha_x\frac{nC^5}{\sqrt{\pi}} - \alpha_y\frac{nC^5}{4\sqrt{\pi}} - \alpha_z\frac{nC^5}{4\sqrt{\pi}}\right)\right. \\ & +\frac{\partial U_y}{\partial y}\left(\chi_\sigma\frac{nC^3}{4\sqrt{\pi}} - \alpha_x\frac{nC^5}{4\sqrt{\pi}} - \alpha_y\frac{3nC^5}{8\sqrt{\pi}} - \alpha_z\frac{nC^5}{8\sqrt{\pi}}\right) \\ & \left.+\frac{\partial U_z}{\partial z}\left(\chi_\sigma\frac{nC^3}{4\sqrt{\pi}} - \alpha_x\frac{nC^5}{4\sqrt{\pi}} - \alpha_y\frac{nC^5}{8\sqrt{\pi}} - \alpha_z\frac{3nC^5}{8\sqrt{\pi}}\right)\right] \\ & +\frac{m\mu}{3nkTC^2}\nabla.U\left[\chi_\sigma\frac{nC^3}{\sqrt{\pi}} - \alpha_x\frac{3nC^5}{4\sqrt{\pi}} - \alpha_y\frac{3nC^5}{4\sqrt{\pi}} - \alpha_z\frac{3nC^5}{4\sqrt{\pi}}\right]. \end{aligned}$$

En développant cette dernière expression et en ordonnant les termes suivant les gradients  $\frac{\partial T}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial U_x}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial U_y}{\partial y}$ , et  $\frac{\partial U_z}{\partial z}$ , on obtient

$$\begin{aligned} Q_{0\varphi} = & \frac{\sigma_1 m\lambda_c}{20 kT}C^2\frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\mu mC}{kT\sqrt{\pi}}\left[\frac{\partial U_x}{\partial x}\left(\chi_\sigma - \frac{3\alpha_x}{4}C^2\right) - \frac{\partial U_y}{\partial y}\left(\chi_\sigma + \frac{\alpha_y - \alpha_z}{8}C^2\right)\right. \\ & \left.- \frac{\partial U_z}{\partial z}\left(\chi_\sigma + \frac{\alpha_z - \alpha_y}{8}C^2\right)\right] \end{aligned}$$

où  $\sigma_1 = 3\alpha_x + \alpha_y + \alpha_z$ . Ce résultat peut se réécrire encore sous la forme

$$\begin{aligned} Q_{0\varphi} = & \frac{\sigma_1 m\lambda_c}{20 kT}C^2\frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\mu mC}{12kT\sqrt{\pi}}(\sigma_0C_w^2 + \alpha_yU_y^2 + \alpha_zU_z^2)\left[3\frac{\partial U_x}{\partial x} - \nabla.U\right] + \\ & \frac{\mu mC^3}{4kT\sqrt{\pi}}\left[3\alpha_x\frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\alpha_y - \alpha_z}{2}\frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\alpha_z - \alpha_y}{2}\frac{\partial U_z}{\partial z}\right] \end{aligned}$$

**calcul de  $\int_{\Omega'}|V'_x|F^0(V')\varphi(V')dV'$**

Comme dans le cas du calcul de  $Q_{0\varphi}$ , les termes de  $\varphi(V')$  qui ne conduisent pas à une intégrale nulle sont ceux de la liste (38). En exprimant  $\varphi(V')$ , il vient alors

$$\begin{aligned} \int_{\Omega'}|V'_x|F^0(V')\varphi(V')dV' = & \frac{2\lambda_c}{nkTC_0^2}\frac{\partial T}{\partial x}\int_{\Omega'}V'_x|V'_x|F^0(V')dV' \\ & -\frac{4\lambda_c}{5nkTC^4}\frac{\partial T}{\partial x}\int_{\Omega'}V'_xV'^2|V'_x|F^0(V')dV' \\ & +\frac{2\mu}{nkTC^2}\int_{\Omega'}\left(V'_x\frac{\partial U_x}{\partial x} + V'^2_y\frac{\partial U_y}{\partial y} + V'^2_z\frac{\partial U_z}{\partial z}\right)|V'_x|F^0(V')dV' \\ & -\frac{2\mu}{3nkTC^2}\nabla.U\int_{\Omega'}V'^2|V'_x|F^0(V')dV' \end{aligned}$$

En utilisant ensuite la table des intégrales on trouve,

$$\int_{\Omega'} |V'_x| F^0(V') \varphi(V') dV' = \frac{\mu C}{kT\sqrt{\pi}} \left( \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{1}{2} \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{1}{2} \frac{\partial U_z}{\partial z} \right) - \frac{2\mu C}{3kT\sqrt{\pi}} \nabla \cdot U ;$$

ce qui s'écrit encore,

$$\int_{\Omega'} |V'_x| F^0(V') \varphi(V') dV' = \frac{\mu C}{6kT\sqrt{\pi}} \left( 3 \frac{\partial U_x}{\partial x} - \nabla \cdot U \right)$$

On peut déduire alors le calcul suivant

$$\int_{\Omega'} |V'_x| [F_0 + F_0 \varphi(V')] d\xi' = \frac{nC}{2\sqrt{\pi}} + \frac{\mu C}{6kT\sqrt{\pi}} \left[ 3 \frac{\partial U_x}{\partial x} - \nabla \cdot U \right]$$

## calcul des intégrales $J_1$ , $J_2$ , $J_3$ , et $J_4$

### calcul de $J_1$ et de $J_2$

$$J_1 = \int_{\Omega'} \varphi(V') F^0 dV' \quad J_2 = \int_{\Omega'} V'_x \varphi(V') F^0 dV'$$

Grace à l'expression de  $\varphi(V')$ , donnée par la relation (37), on peut voir que les termes de l'expression de  $J_1$  et  $J_2$  ne donnant pas à une intégrale nulle, sont encore les termes qui proviennent des éléments de la liste (38). Ainsi, les expressions d'intégrales dont on a besoin pour calculer  $J_1$  sont :

$$\int_{\Omega'} V'_x F^0(V') = -\frac{nC}{2\sqrt{\pi}} \quad \int_{\Omega'} V'^2 V'_x F^0(V') = -\frac{nC^3}{\sqrt{\pi}}$$

$$\int_{\Omega'} V_x'^2 F^0(V') = \int_{\Omega'} V_y'^2 F^0(V') = \int_{\Omega'} V_z'^2 F^0(V') = \frac{nC^2}{4}$$

$$\int_{\Omega'} V'^2 F^0(V') = \frac{3nC^2}{4}$$

En développant l'expression (37) de  $\varphi(V')$  et en utilisant les valeurs de ces intégrales, on trouve

$$J_1 = -\frac{\lambda_c}{5kTC\sqrt{\pi}} \frac{\partial T}{\partial x} .$$

Soit encore, en utilisant la relation  $\lambda_c = \mu \frac{15}{4} \frac{k}{m}$ ,

$$J_1 = -\frac{3}{4} \frac{\mu}{mTC\sqrt{\pi}} \frac{\partial T}{\partial x} .$$

D'autre part les valeurs d'intégrales dont on a besoin pour calculer  $J_2$  sont :

$$\int_{\Omega'} V_x'^2 F^0(V') = \frac{nC^2}{4} \quad \int_{\Omega'} V_x'^2 V'^2 F^0(V') = \frac{5nC^4}{8}$$

$$\int_{\Omega'} V_x'^3 F^0(V') = -\frac{nC^3}{2\sqrt{\pi}}$$

$$\int_{\Omega'} V_x' V_y'^2 F^0(V') = \int_{\Omega'} V_x' V_z'^2 F^0(V') = -\frac{nC_0^3}{4\sqrt{\pi}}$$

$$\int_{\Omega'} V_x' V'^2 F^0(V') = -\frac{nC^3}{\sqrt{\pi}}$$

En utilisant l'expression de  $\varphi(V')$  et les valeurs de ces intégrales, on trouve

$$J_2 = -\frac{\mu C}{2kT\sqrt{\pi}} \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\mu C}{6kT\sqrt{\pi}} \nabla \cdot U$$

**calcul de  $J_3$  et de  $J_4$**

$$J_3 = \int_{\Omega'} V_y' \varphi(V') F^0 dV', \quad J_4 = \int_{\Omega'} V_x' V_y' \varphi(V') F^0 dV'$$

Ici, les termes provenant de l'expression de  $\varphi(V')$  (relation (37)), qui ne donnent pas une intégrale nulle dans l'expression de  $J_3$  et  $J_4$ , sont les termes provenant des éléments suivants de  $\varphi(V')$  :

$$V_y' \frac{\partial T}{\partial y}; \quad V_y' V'^2 \frac{\partial T}{\partial y}; \quad V_x' V_y' \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right)$$

Ainsi les valeurs d'intégrales dont on a besoin pour le calcul de  $J_3$  sont

$$\int_{\Omega'} V_y'^2 F^0(V') = \frac{nC^2}{4}, \quad \int_{\Omega'} V_y'^2 V'^2 F^0(V') = \frac{5nC^4}{8}, \quad \int_{\Omega'} V_x' V_y'^2 F^0(V') = -\frac{nC^3}{4\sqrt{\pi}}.$$

Utilisant l'expression de  $\varphi(V')$  et les valeurs de ces intégrales on a le résultat

$$J_3 = -\frac{\mu C}{2kT\sqrt{\pi}} \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right)$$

De même les intégrales à utiliser pour le calcul de  $J_4$  sont

$$\int_{\Omega'} V_x' V_y'^2 F^0(V') = -\frac{nC^3}{4\sqrt{\pi}}, \quad \int_{\Omega'} V_x' V_y'^2 V'^2 F^0(V') = -\frac{3nC^5}{4\sqrt{\pi}}, \quad \int_{\Omega'} V_x'^2 V_y'^2 F^0(V') = \frac{nC^4}{8}.$$

Utilisant l'expression de  $\varphi(V')$  et ces valeurs d'intégrales, on trouve

$$J_4 = \frac{\lambda_c C}{10kT\sqrt{\pi}} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\mu C^2}{4kT} \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right).$$

On peut réécrire aisément ces résultats obtenus pour  $J_3$  et  $J_4$  en utilisant les relations  $2kT = mC^2$ , et  $\lambda_c = \mu \frac{15}{4} \frac{k}{m}$ .

# Références bibliographiques

## Les thèses

- [1] L. H. Holway. *Approximation procedures for kinetic theory*. PhD thesis, Havard University, 1963.
- [2] Michel Larini. *Discontinuités de températures parietales dans un gaz polyatomique hors d'équilibre*. PhD thesis, Université de Provence -Aix Marseille 1, 1973.
- [3] Bernard Zappoli. *Approche cinétique des phénomènes de relaxation dans un gaz diatomiques*. PhD thesis, Université de Provence - Aix Marseille 1, 1979.
- [4] Loïc Aufrère. *Etude de l'interaction gaz/paroi en régime hypersonique*. PhD thesis, Université de Provence - Aix Marseille 1, 2000.

## Les livres et les rapports

- [5] Carlo Cercignani, Reinhard Illner, and Mario Pulvirenti. *The Mathematical Theory of Dilute Gases*. Springer-Verlag, 1994.
- [6] Carlo Cercignani. *Mathematical Methods in Kinetic Theory*. plenum press new york, second edition, 1990.
- [7] Carlo Cercignani. *The Boltzmann equation and its applications*. Springer-Verlag, new york, 1988.
- [8] Carlo Cercignani. *Theory and Application of the Boltzmann Equation*. Scottish Academic Press, Edinburgh, 1975.
- [9] C. S. Wang Chang and G. E. Uhlenbeck. ... Report M999, University of Michigan, 1953.
- [10] Carlo Cercignani. Higher order slip according to the linearized boltzmann equation. Report AS-64-19, ..., 1964.
- [11] E. H. Kennard. *Kinetic Theory of Gases*. McGraw-Hill, 1938.
- [12] G. A. Bird. *Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows*. 42. Oxford Science Publications, oxford, oxford engineering science edition, 1994.
- [13] George Em Karniadakis and Ali Beskok. *MICRO FLOWS Fundamentals and Simulation*. Springer-Verlag, 2002.
- [14] H. Grad. *Principles of the kinetic theory of gases*, volume 2. Encyclopedia of physics, Springer Verlag, 1958.
- [15] H. Schlichting. *boundary-layer theory*. Mc Graw-Hill, New york, seventh edition, 1979.
- [16] Jhon J. Bertin. *Hypersonic Aerothermodynamics*. Education. AIAA, 1994.

- [17] Lester LEES. Hypersonic research project : A kinetic theory description of rarefied gas flows. Memorandum 51, Guggenheim aeronautical laboratory, CALTECH, Pasadena California, 1959.
- [18] R. Brun. *Transport et relaxation dans les écoulements gazeux*. Masson, 1986.
- [19] Roberto Monaco. *Introduction à la théorie et aux applications de l'interaction gaz-paroi en théorie cinétique des gaz*. Dipartimento di Matematica Politecnico Torino, Torino-Corso, libreria editrice universitaria levrotto et bella edition, 1986.
- [20] Samuel Albert Schaaf and Paul L. Chambre. *Flow of rarefied gases*. Princeton, N.J., Princeton University Press, 1961.
- [21] S. Chapman and T.G. Cowling. *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*. Cambridge Mathematical Library, third edition edition, 1970.

### Les articles de revues

- [22] A. Beskok and G. E. Karniadakis. Simulation of heat and momentum transfer in complex micro-geometries. *AIAA Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 8(4) :647, 1994.
- [23] A. Knuth and E. Warburg. ... *Pogg. Ann.*, 156 :177, 1875.
- [24] B. T. Porodonov, P. E. Suetin, S. F. Borisov, and V. D. Akinshin. Experimental investigation of rarefied gas flows in different channels. *Journal of Fluid Mechanics*, 64(3) :417–437, 1974.
- [25] Carlo Cercignani. A variational principle for boundary value problems in kinetic theory. *Journal of Statistical Physics*, 1(2) :297–311, 1969.
- [26] C. Cercignani and M. Lampis. Kinetic models for gas-surface interactions. *transport theory and statistical physics*, 1(2) :101–114, 1971.
- [27] C. Cercignani. Scattering kernels for gas-surface interactions. *transport theory and statistical physics*, 2(1) :27–53, 1972.
- [28] C. Cercignani and M. Lampis. New scattering kernel for gas-surface interaction. *AIAA journal*, 35(6), 1997.
- [29] C. Cercignani and M. Lampis. A new model for the boundary conditions of the boltzmann equation. *Mechanics Research Communication*, 26(4) :451–456, 1999.
- [30] C. Cercignani, M. Lampis, and A. Lentati. A new scattering kernel in kinetic theory of gases. *transport theory and statistical physics*, 24(9) :1319–1336, 1995.
- [31] C. M. Huang, R. V. Tompson, T. K. Ghosh, I. N. Ivchenko, and S. K. Loyalka. Measurements of thermal creep in binary gas mixtures. *physics of fluids*, 11(6) :1662–1672, 1999.
- [32] Duncan A. Lockerby, Jason M. Reese, David R. Emerson, and Robert W. Barber. Velocity boundary condition at solid walls in rarefied gas calculations. *Physical Review E*, 70(1) :017303, 2004.
- [33] D. Bruno, M. Cacciatore, S. Longo, and M. Rutigliano. Gas-surface scattering models for particle fluid dynamics : a comparison between analytical approximate models and molecular dynamics calculations. *chemical physics letters*, 320(2000) :245–254, 2000.
- [34] Duncan A. Lockerby, Jason M. Reese, and Michael A. Gallis. Capturing the knudsen layer in continuum-fluid models of nonequilibrium gas flows. *AIAA Journal*, 43(6) :1391–1393, 2005.

- [35] D. Roger Willis. Comparison of kinetic theory analyses of the linearized couette flow. *The Physics of Fluids*, 5(2) :127, 1962.
- [36] Errol B. Arkilic, Kenneth S. Breuer, and Martin A. Schmidt. mass flow and tangential momentum accommodation in silicon micromachined channels. *Journal of Fluids Mechanics*, 437 :29–47, 2001.
- [37] E. Ng, N. Liu, and X. Mao. Stress-density ratio slip-corrected reynold equation for ultra-thin film gas bearing lubrication. *The Physics of Fluids*, 14(1450), 2002.
- [38] Eugène P. Gross and E. Atlee Jackson. Kinetic models and the linearized boltzmann equation. *The Physics of Fluids*, 2(4) :432–441, 1959.
- [39] F. B. Hason and T. F. Morse. Kinetic models for a gas with internal structure. *Physics of Fluids*, 10(2) :345–353, 1967.
- [40] F. Hurbult and F. S. Sherman. Application of the nocilla wall refelction model to free-molecule kinetic theory. *Physics of fluids*, 11 :486–496, 1968.
- [41] F. O. Goodman. On the theory of accommodation coefficients–iv. simple distribution function theory of gas-solid interaction systems. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 26(1) :85–105, 1965.
- [42] F. O. Goodman. Theory of light-induced drift. v. roles of accommodation of normal and tangential momenta in surface light-induced drift. *Physical Review A*, 68(013403), 2003.
- [43] Felix Sharipov. heat transfer in the knudsen layer. *Physical Review E*, 69(061201) :061201–1, 2004.
- [44] Felix Sharipov. application of the cercignani-lampis scattering kernel to calculations of rarefied gas flows. 1. plane flow between two parallel plates. *European Journal of Mechanics, B/Fluids*, 21(2002), 2001.
- [45] G. E. Cook. Satellite drag coefficients. *Planetary and Space Science*, 13(10) :929–946, 1965.
- [46] Herbert J. Bomelburg. heat loss from very thin heated wires in rarefied gases. *Physics of Fluids*, 2(0) :717–712, 1959.
- [47] H. M. Mott-Smith. The solution of the boltzmann equation for a shock wave. *Physical Review*, 82(6) :885–892, 1951.
- [48] Henning Struchtrup and Wolf Weiss. Temperature jump and velocity slip in the moment method. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 12 :1–18, 2000.
- [49] Imtiaz Ahmed and Ali Beskok. Rarefaction, compressibility, and viscous heating in gas microfilters. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 16(2) :161–170, 2002.
- [50] I. Kuscer. Reciprocity in scattering of gas molecules by surfaces. *Surface Science*, 25(2) :225–237, 1971.
- [51] J. Clerck Maxwell. On stresses in rarified gases arising from inequalities of temperature. *Philosophical Transactions of the royal society of London*, 170 :231–256, 1878.
- [52] J. Darrozes and J. P. Guiraud. *CRASS*, A(262) :1362, 1966.
- [53] J. Gilbert Méolans and Loïc Aufrère. interaction d’un gaz polyatomique avec une paroi : expression du noyau. *C. R. Acad. Sci. Paris, Mécanique des fluides/fluids mechanics*, t.329(2 b), 2001.
- [54] J. G. Méolans. Thermal slip boundary conditions in vibrational nonequilibrium flows. *Mechanics Research Communications*, 30 :629, 2003.



- [55] J. T. Lin and D. R. Willis. Kinetic theory analysis of temperature jump in polyatomic gas. *Physics of Fluids*, 15(1) :31–38, 1972.
- [56] Kazuo Aoki, Hiroaki Yoshida, and Toshiyuki Nakanishi. Inverted velocity profile in the cylindrical couette flow of a rarefied gas. *Physical Review E*, 68(016302) :016302–1, 2003.
- [57] Loïc Aufrère and J. Gilbert Méolans. Fonction de distribution pour les gaz polyatomiques dans la couche de knudsen. solution approchée de l'équation de boltzmann. *C. R. Acad. Sci. Paris, Mécanique des fluides/fluids mechanics*, t.329(2 b), 2001.
- [58] Lester Lees. kinetic theory description of rarefied gas flow. *J. Soc. Indust. App. Math*, 13(1) :278, 1965.
- [59] Lester Lees and Chung-Yen Liu. kinetic theory description of conductive heat transfer from a fine wire. *Physics of Fluids*, 5(10) :1137–1148, 1962.
- [60] Morris D., Hannon L., and Garcia A. Slip length in a dilute gas. *Physical Review A*, A 46(5279) :5279, 1992.
- [61] Melvin Epstein. A model of the wall boundary condition in kinetic theory. *AIAA Journal*, 5(10) :1797, 1967.
- [62] Mohamed Gad el hak. Flow physics in mems. *Mec. Ind. (Review)*, 2 :313–341, 2001.
- [63] Michel Larini and Raymond Brun. Discontinuités de températures pariétales dans un gaz polyatomique hors d'équilibre. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 16 :2189–2203, 1973.
- [64] M. N. Kogan. Kinetic theory in aerothermodynamics. *Prog. Aerospace Sci.*, 29 :271, 1992.
- [65] M. V. Smoluchowski. wärmeleitung in verdünnten gasen annalen der physik und chemie. *Wied. Ann.*, (64) :101, 1899.
- [66] Nicolas G. Hadjiconstantinou. Dissipation in small scale gaseous flows. *Journal of Heat Transfer*, 125(5) :944–947, 2003.
- [67] Nicolas G. Hadjiconstantinou. Comment on cercignani's second-order slip coefficient. *Physics of Fluids*, 15(8) :2352–2354, 2003.
- [68] Osborne Reynolds. On certain dimensional properties of matter in gaseous state. *Philosophical Transactions of the royal society of London*, part 2 :..., 1879.
- [69] Pierre Andries, Patrick Le Tallec, Jean Philippe Perlat, and Benoît Perthame. The gaussian-bgk model of boltzmann equation with small prandtl number. *European Journal of Mechanics - B/ Fluids*, 19(6) :813–830, 2000.
- [70] P Moore and Sowter. Application of a satellite aerodynamics model based on normal and tangential momentum accommodation coefficients. *Planet Space Science*, 39(10) :1405, 1419 1991.
- [71] Peter Panzer, Mario Liu, and Dietrich Einzel. The effect of boundary curvature on hydrodynamic fluid flow : calculation of slip lengths. *International Journal of Modern Physics B*, 6(20) :3251–3278, 1992.
- [72] Pierre Welander. On the temperature jump in rarefied gas. *Arkiv för Fysik*, 7(44) :507, 1954.
- [73] R. Brun and B. zappoli. Model equation for a vibrationnally relaxing gas. *Physics of Fluids*, 20(9) :1441–1448, 1977.

- [74] R. G. Lord. Some extensions to the cercignani-lampis gas-surface scattering kernel. *Physic of Fluids*, A3(4) :706–710, 1991.
- [75] R. G. Lord. Some further extensions to the cercignani-lampis gas-surface interaction model. *Physic of Fluids*, 7(5) :1159, 1995.
- [76] R. K. Hason. experimental study of shock-wave reflection from a thermally accommodating wall. *Physics of Fluids*, 16(3) :369, 1973.
- [77] R. Monaco and G. Rizzi. ... *Méccanica J. of AIMETA*, 13(4) :195, 1978.
- [78] R. N. Gupta, C. D. Scott, and J. N. Moss. Surface slip equations for low-reynold-number multicomponents gas flows. *AIAA Paper*, 84 :1732, 1984.
- [79] Roop N. Gupta and Carl D. Scott. Comment on corrective term in wall slip equations for knudsen layer. *AIAA Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 10(1) :190–191, 1996.
- [80] Sergio Albertoni, Carlo Cercignani, and Laura Gotusso. Numerical evaluation of slip coefficient. *The Physics of Fluids*, 6(7) :993, 1963.
- [81] S. F. Shen. parametric representations of gas-surface interaction data and the problem of slip -flow boundary conditions with arbitrary accommodation coefficients. *Entropie*, 18 :138–145, november-december 1967.
- [82] S. Kokou Dadzie and J. Gilbert Meolans. Anisotropic scattering kernel : Generalized and modified maxwell boundary conditions. *Journal of Mathematical Physics*, 45(5) :1804–1819, 2004.
- [83] S. K. Loyalka. Momentum and temperature-slip coefficients with arbitrary accommodation at the surface. *Journal of Chemical Physics*, 48(12) :5432–5436, 1968.
- [84] Silvio Nocilla. Basic concepts in the surface interaction of free-molecular flows or molecular beams. *Meccanica*, 2 :34, 1967.
- [85] T. F. Morse. Kinetic model for gases with internal degrees of freedom. *The Physics of Fluids*, 7(2) :159–169, 1964.
- [86] T. G. Cowling. on the cercignani-lampis formula for gas-surface interactions. *Journal of PhysicsD : Applied Physics*, 7(6) :781–785, 1974.
- [87] W. Kevin Tibbs, Florence Baras, and L. Alejandro Garcia. Anomalous flow profile due to the curvature effect on slip length. *Physical Review E*, 56(2) :2282–2283, 1997.
- [88] William P. Teagan and George S. Springer. heat transfer and density-distribution measurements between parallel plates in the transition regime. *Physics of Fluids*, 11(3) :497–506, 1968.
- [89] Yildiz Bayazitoglu and Gokturk Tunc. Extended slip boundary conditions for microscale heat transfer. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 16(3) :472–475, 2002.
- [90] Y. Sungtaek Ju. Thermal conduction and viscous heating in microscale couette flows. *Journal of Heat Transfer*, 122 :817–818, 2000.
- [91] Yoshio Sone, Taku Ohwada, and Kazuo Aoki. Temperature jump and knudsen layer in a rarefied gas over a plane wall : Numerical analysis of the linearized boltzmann equation for hard-sphere molecules. *Physics of Fluids A : Fluid Dynamics*, 1(2) :363–370, 1989.

## Les articles de congrès

- [92] A. J. F. Larmit A. J. Kruger and M. H. de Wit. flow of rarefied gas through a long capillary (cylindrical or bounded by planes), generated by temperature gradient. In *7<sup>th</sup> International symposium on Rarefied Gas Dynamics*, pages 1015–1022, 1970.
- [93] B. Petek and I. Kuscer. In Campargue, editor, *Rarefied Gas Dynamics*, volume 2, page 1399, CEA Paris, 1979. Campargue.
- [94] C. Cercignani. In *SIAM-AMS proceeding, Transport theory*, volume 1, page 249, New York, 1968. G. Birkhoff, et. al. Edition, Providence.
- [95] C. Cercignani. scattering kernels for gas-surface interaction. In *Workshop on Hypersonic Flows for Reentry Problems*, volume 1, pages 9–29, Sophia Antipolis, France, 1990. INRIA Antibes.
- [96] H. Grad. On the kinetic theory of rarefied gases. In *Communications on pure and applied mathematics*, volume 2, pages 331–407, 1949.
- [97] I. Kuscer. Phenomenology of gas-surface accommodation. In *International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Göttingen*, volume E1, pages 1–21, 1974.
- [98] I. Kuscer, J. Mozina, and F. Krizanac. In D. Dini et. al, editor, *Rarefied Gas Dynamics*, volume 1, page 97, 1974.
- [99] I. N. Larina and V.A. Rykov. the boundary condition on the body surface for a diatomic gas. In *15<sup>th</sup> International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Teubner, page 635, 1986.
- [100] J. E. McCune, T. F. Morse, and G. Sandri. On the relaxation of gases toward continuum flow.
- [101] J. G. Méolans and I. A. Graur. New thermal conditions at the wall in high speed flows. comparison with measurements. In *23<sup>rd</sup> International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Whistler, British Columbia, Canada*, july 2002.
- [102] J. J. Hinchey and W. M. Foley. In J. H. Leauw, editor, *International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*. Press Inc. new york, 1966.
- [103] Jun Matsui. Numerical study of molecular scattering on the thermal equilibrium surface with adsorbates. In Andrew D. Ketsdever and E. P. Muntz, editors, *23<sup>rd</sup> International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, pages 957–964. American Institute of Physics, 2002.
- [104] M. N. Kogan. In *International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, pages 367–399. Plenum Press New york, 1969.
- [105] M. Seidl and E. Steinheil. Measurement of momentum accommodation coefficients on surfaces characterized by auger spectroscopy, sims and leed in : M. beck, m. fiebig. In *International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, volume 9, pages E9.1–E9.2, 1974.
- [106] N. Bellomo, C. Dankert H. Legge, and R. Monaco. Drag, heat flux, and recovery factor measurements in free molecular hypersonic flow. In A. K. Rebrov, editor, *International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, volume 1. Plenum New york, 1985.
- [107] R. G. Lord. Application of the c.l. scattering kernel to dsmc calculations. In E. Alfred, editor, *17<sup>th</sup> International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Aachen*. Beylich, 1990.

- [108] S. Nocilla. The surface re-emission law in free molecule flow. In J.A. Laurman, editor, *3<sup>th</sup> International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, Aachen*, 1963.
- [109] S. F. Shen. A theory of the slip-flow boundary conditions over a surface defined by arbitrary gas-surface interaction parameters. In *5<sup>th</sup> International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, July 1966*, volume 4, pages 623–640, july 1967.
- [110] W. Mandell and J. West. On the temperature gradient in gases at various pressures. In *proceedings physical society of London*, volume 37, pages 20–41, 1924.
- [111] W. J. C. Müller. parametric representation of beam accommodation coefficients. In Gottingen, editor, *International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, page E12, 1974.
- [112] Y. Sun, R.W. Barber, and D. R. Emerson. Impact of accommodation coefficient on concentric couette flow. In *24<sup>th</sup> International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*. AIP, july 2004.

# Les articles issus de ce mémoire

[1] S. K. Dadzie and J. G. Méolans, Anisotropic scattering kernel : Generalized and modified Maxwell boundary conditions, **Journal of Mathematical Physics**, **45**, (5), **1804-1819 (2004)**

[2] S. K. Dadzie and J. G. Méolans, Temperature jump and slip velocity calculations from an anisotropic scattering kernel, **Physica A**,**358**,(2-4) **328-346 (2005)**

[3] J. G. Méolans and S. K. Dadzie, Scattering kernel for polyatomic molecules, **Journal of Mathematical Physics**, **46**, (6), (2005)

[4] S. Kokou Dadzie and J. Gilbert Méolans, Slip length and problem of anomalous velocity profiles, **4th Theoretical Fluids Mechanics Meeting, Toronto June 2005, in AIAA journal Proceeding**

## Anisotropic scattering kernel: Generalized and modified Maxwell boundary conditions

S. Kokou Dadzie<sup>a)</sup> and J. Gilbert Méolans<sup>b)</sup>

*Polytech'Marseille, Département de Mécanique Energétique—UMR CNRS 6595,  
5, rue Enrico Fermi, 13453 Marseille cedex 13, France*

(Received 28 October 2003; accepted 30 January 2004; published 1 April 2004)

This article presents a model of a scattering kernel of boundary conditions for the Boltzmann equation. The proposed scattering kernel is based on an anisotropic accommodation argument. Three parameters equal to the momentum accommodation coefficients are shown as characterizing the influence of each direction. First the new scattering kernel is derived from a phenomenological criticism of the first form of the scattering kernel proposed by Maxwell; then the same result is established from an analytic approach based on the spectral nature of the linear integral operator associated to the scattering kernel problem. As a result, the model provides a correct form of scattering kernel to handle the influence of each direction in particle collisions with the wall. Finally independent accommodation of each internal mode is added to extend the model to the case of polyatomic gases. © 2004 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.1690491]

### I. INTRODUCTION

The problem of writing good boundary conditions for the Boltzmann equation in rarefied gas flows is to find an operator called the scattering kernel in kinetic theory. The first known scattering kernel was proposed by Maxwell and is based on phenomenological argument.<sup>1</sup> However, in various situations this kernel fails to reproduce correctly the phenomena occurring at the wall.<sup>2,3</sup> Indeed the Maxwell boundary condition corresponds to an isotropic conception of the reflection at the wall; so, in this approach, the three velocity components are considered as equivalent in the accommodation process.

Another class of scattering kernel is the CL (*Cercignani–Lampis*) model by Cercignani *et al.*<sup>3,4</sup> The authors extend the research to a more general field of operators and obtain a more flexible model. However, as is well-known, this class of scattering kernels is not totally efficient to describe physically gas behavior close to the wall.<sup>4</sup> Moreover, some results in particle simulation of rarefied gas flows seem to show that none of the existing models of the scattering kernel can reproduce all the features of the real gas dynamics.<sup>5</sup>

Generally the existing models of the scattering kernel do not describe the interplay between the different degrees of freedom (i.e., the three velocity components of the particle and its internal energy modes) in interaction with the wall.<sup>5</sup> This would explain the partial inefficiency of these models to reproduce the behavior of high speed nonequilibrium flows near the wall. The main purpose of this article is to propose a new model of scattering kernel by considering more possible reflection types of particles at the wall. In this way we attempt to eliminate any isotropic character of momentum accommodation in the velocity reflection process, and we introduce three coefficients to take into account the influence of the velocity directions.

From Sec. II to Sec. VI, we consider only unstructured atom-like molecules. In Sec. II the basic conditions required for a scattering kernel are briefly analyzed and discussed. In Sec. III the Maxwell phenomenological argument is recalled and we present the new model. In Sec. IV we

<sup>a)</sup>Electronic mail: kokou.dadzie@polytech.univ-mrs.fr

<sup>b)</sup>Electronic mail: gilbert.meolans@polytech.univ-mrs.fr; <http://www.polytech.univ-mrs.fr>

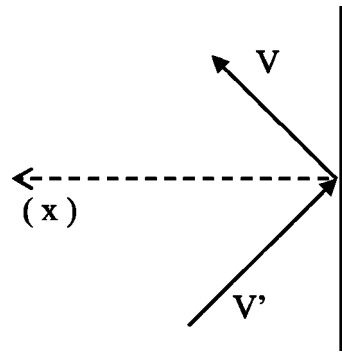


FIG. 1. Particle hitting the wall.

develop a consistent analytical approach to build the new scattering kernel. In Sec. V the coefficients introduced in the modeling are shown to equal the well known momentum accommodation coefficients. Finally, in Sec. VI the new kernel is involved in a more complete model characterizing molecules with internal modes by using a phenomenological derivation.

**II. CONDITIONS REQUIRED FOR THE SCATTERING KERNELS**

Let us consider a particle hitting the wall, as shown in Fig. 1.  $V'$  is the velocity of the impinging gas particle referred to the wall,  $V' = (V'_x, V'_y, V'_z) \in \{\Omega' = \mathbb{R}_- \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}\}$  and  $V$  is the velocity of the reflected one referred to the wall,  $V = (V_x, V_y, V_z) \in \{\Omega = \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}\}$ . These velocities reduce to peculiar velocities when the slip velocity at the wall is neglected.  $V_R$  is defined as  $V_R = (-V_x, V_y, V_z)$ .

The kernel,  $B(V', V)$ , is the density of probability that a molecule impinging the wall at any point  $X$  of the wall with velocity  $V'$  is reflected at the same point with velocity  $V$ . This kernel, which turns the impinging particles at the wall into reflected ones, must satisfy some basic physical conditions. The least obvious of them is the reciprocity relation. This relation is a necessary condition for a good scattering kernel in the kinetic theory of gases.<sup>6,7</sup>

According to the scattering kernel probability density property, kernel  $B(V', V)$  must satisfy

$$B(V', V) \geq 0 \quad , \tag{1}$$

and also the normalization condition

$$\int_{\Omega} B(V', V) dV = 1. \tag{2}$$

Finally, the balance of particles hitting the wall at position  $X$  and reflected with velocity  $V$  at a given time may be written<sup>8</sup>

$$V_x f(V) = \int_{\Omega'} |V'_x| f(V') B(V', V) dV', \tag{3}$$

where  $f(V)$  is the gas particle distribution function given by the Boltzmann equation.

In the thermodynamic equilibrium state between the gas and the wall at the same temperature, the time reversibility assumption of the thermodynamic equilibrium state may be formulated as follows:<sup>3,7,9</sup> the number of gas particles which hit the wall during time  $t$ , with velocity  $V'$ , and reflect with velocity  $V$  at position  $X$  of the wall, is equal to the number of particles with incident velocity  $-V$  reflected with velocity  $-V'$  at the same time  $t$ , at the same position  $X$  of the wall. This may be written

$$|V'_x|f_0(V')B(V',V)=|V_x|f_0(-V)B(-V,-V'), \quad (4)$$

where  $f_0(V) = n/(C_w\sqrt{\pi})^3 e^{-\|V\|^2/C_w^2}$  is the Maxwellian distribution function of the gas in equilibrium state at the temperature of the wall.  $C_w^2 = 2kT_w/m$ , where  $T_w$  is the wall temperature,  $k$  is the Boltzmann constant,  $m$  is the molecular mass of gaseous particles and  $n$  is their numerical density. The time reversibility assumption means that all detailed balancing of energy exchange between the gas and the wall in the thermodynamic equilibrium state at any time  $t$  is equal to zero. This state of thermodynamic equilibrium between the gas and the wall at the same temperature is a reference state. Owing to this fact, any scattering kernel in kinetic theory must be validated by the property (4), called the reciprocity relation.

Note that the normalization condition (2) is equivalent to

$$\int_{\Omega'} B(-V, -V'_R) dV' = 1.$$

From this remark, the reciprocity relation also leads to

$$\int_{\Omega'} |V'_x|f_0(V')B(V'_R, V) dV' = |V_x|f_0(-V). \quad (4')$$

It is also necessary to note that the required conditions formulated above characterize a physical situation at the wall involving the conservation of the particle flux and then a binary and short interaction between the solid atoms and gaseous particles.<sup>9</sup> So the model presented here excludes the gas dissociation and various steps involved in catalysis (chemical reaction at the wall, adsorption, etc.).

### III. PHENOMENOLOGICAL APPROACH TO SCATTERING KERNELS

#### A. Maxwell scattering kernel

The first form of the scattering kernel proposed by Maxwell is given by

$$B_M(V', V) = (1 - \alpha)\delta(V - V'_R) + \alpha \frac{2}{C_w^4 \pi} V_x e^{-\|V\|^2/C_w^2}. \quad (5)$$

$B_M(V', V)$  is a linear combination of two elementary kernels: the Dirac function for the specular reflection part and the exponential function for the diffuse reflection part at temperature  $T_w$  of the wall;  $\alpha$ , called the accommodation coefficient, represents the weight of the diffusion in the gas collision process at the wall.

Before writing this scattering kernel Maxwell made several phenomenological comments on the nature of the surface in contact with the gas, which can be found in the appendix of Ref. 1. First, he assumed the surface to be a “perfectly elastic smooth surface.” Then each molecule striking the surface had its normal component reversed while the other components were not altered by the impact; the scattering kernel in this case was simply given by  $\delta(V - V'_R)$ . Second, he assumed the surface to be a perfectly absorbing surface so that each particle hitting the wall was absorbed before being reemitted, and the velocity of each reemitted particle was oriented from the surface towards the gas. But the probability of any particular magnitude and direction of its velocity would be the same as in a gas at rest in the thermal equilibrium state at the temperature of the wall; in this case, this led to the diffusive scattering kernel given by  $(2/C_w^4 \pi) V_x e^{-\|V\|^2/C_w^2}$ .

Finally, Maxwell decided to consider the real reflecting surfaces as an intermediate surface between these two extreme perfect surfaces and then proposed the linear combination (5).

In our view, the scattering process on a real surface must be more complicated than those described by the sum of the scattering kernels of the two extreme perfect surfaces. It is easily seen that the two elementary scattering kernels written for the two perfect surfaces are isotropic ones;



this is reasonable for these two types of perfect surfaces. Then, using a linear combination of these two elementary scattering kernels, the result will still be an isotropic one, but we cannot be sure that a scattering kernel characterizing any real surface is an isotropic one. Moreover, in the kernel (5), the weight of the diffusion in any direction is represented by the same coefficient  $\alpha$ : this description cannot be considered as correct, as pointed out by various authors.<sup>2,10</sup>

### B. Our scattering kernel proposal

In order to write a general scattering kernel for any kind of real surface, we return to the investigation of various possible types of accommodation which can occur during a particle collision with the wall. Then we have to consider a more general type of accommodation than the isotropic one, in which of course the normal component of the incoming particle velocity must be reversed during the collision. We can thus assume elementary processes where diffusive and specular reflection are mixed: each of the velocity components can be altered or not by the wall independently of others. This argument leads us to consider the eight elementary operators listed below:

$$B_0(V', V) = \delta(V_x + V'_x) \delta(V_y - V'_y) \delta(V_z - V'_z), \tag{6a}$$

$$B_{yz}(V', V) = \frac{1}{\pi C_w^2} \delta(V_x + V'_x) e^{-V_y^2/C_w^2} e^{-V_z^2/C_w^2},$$

$$B_{xz}(V', V) = \frac{2}{C_w^3 \sqrt{\pi}} V_x \delta(V_y - V'_y) e^{-V_x^2/C_w^2} e^{-V_z^2/C_w^2},$$

$$B_{xy}(V', V) = \frac{2}{C_w^3 \sqrt{\pi}} V_x \delta(V_z - V'_z) e^{-V_x^2/C_w^2} e^{-V_y^2/C_w^2},$$

$$B_{xyz}(V', V) = \frac{2}{\pi C_w^4} V_x e^{-V_x^2/C_w^2} e^{-V_y^2/C_w^2} e^{-V_z^2/C_w^2}, \tag{6b}$$

$$B_z(V', V) = \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(V_x + V'_x) \delta(V_y - V'_y) e^{-V_z^2/C_w^2},$$

$$B_y(V', V) = \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(V_x + V'_x) \delta(V_z - V'_z) e^{-V_y^2/C_w^2},$$

$$B_x(V', V) = \frac{2}{C_w^2} V_x \delta(V_y - V'_y) \delta(V_z - V'_z) e^{-V_x^2/C_w^2}.$$

It is easy to show that each of these elementary kernels satisfies positivity and normalization conditions. These kernels also satisfy the reciprocity relation (more details are given in Appendix A). The coefficients appearing in front of each operator are normalizing coefficients obtained by calculating  $\int_{\Omega} B_{\kappa}(V', V) dV$ .

Each of these elementary kernels represents a particular possible situation of accommodation. Then the complete scattering kernel will be a linear combination of the elementary kernels in which the combination coefficients will represent the weight of each kind of accommodation at the wall. This complete scattering kernel may be written

$$B(V', V) = \sum_{\kappa} \mu_{\kappa} B_{\kappa}(V', V), \tag{7}$$

with

$$\sum_{\kappa} \mu_{\kappa} = 1. \quad (8)$$

If we introduce three coefficients,  $\alpha_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) satisfying  $\alpha_j \in [0, 1]$ , to quantify the influence of each direction in a particle accommodation process by the wall, and taking into account condition (8), the coefficients  $\mu_{\kappa}$  may be written

$$\begin{aligned} \mu_{xz} &= \alpha_x \alpha_z (1 - \alpha_y), \quad \mu_{xy} = \alpha_x \alpha_y (1 - \alpha_z), \quad \mu_{yz} = \alpha_y \alpha_z (1 - \alpha_x), \\ \mu_x &= \alpha_x (1 - \alpha_y)(1 - \alpha_z), \quad \mu_{xyz} = \alpha_x \alpha_y \alpha_z, \quad \mu_0 = (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y)(1 - \alpha_z), \\ \mu_y &= \alpha_y (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_z), \quad \mu_z = \alpha_z (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y). \end{aligned} \quad (9)$$

According to this last relationship, the complete scattering kernel (7) satisfies the positivity and the normalization properties. It obviously satisfies the reciprocity relation since the elementary kernels satisfy it.

It is clear that neglecting the elementary kernels with incomplete diffusion or incomplete specular reflection in the full scattering kernel (7), the result reduces to the sum of the kernels (6a) and (6b) which represents the Maxwell scattering kernel. Moreover, it is easy to show that the Maxwell boundary conditions give satisfactory results for values of  $\alpha$  close to 1: indeed, if the gas is in a state very close to thermodynamic equilibrium at the temperature of the wall, the most important reflection is the reflection with complete accommodation in all directions.

In the following section, an analytical method to build the complete scattering kernel (7) is presented.

#### IV. ANALYTICAL FORMULATION OF THE NEW SCATTERING KERNEL

Let us consider the problem of finding operator  $B(V', V)$ , satisfying the conditions listed in Sec. II, and let us write the transformation

$$K(V, V') = [ |V'_x| f_0(V') ]^{1/2} [ |V_x| f_0(V) ]^{-1/2} B(V'_R, V). \quad (10)$$

Since  $f_0(V)$  is a known function, the problem of finding  $B(V', V)$  is equivalent to finding  $K(V, V')$ . Instead of studying the problem in  $K(V, V')$ , we can study the linear integral associated operator  $A$  defined by the relation

$$A(\psi) = \int_{\Omega} K(V, V') \psi(V') dV'. \quad (11)$$

This integral operator is defined in the Hilbert space of square summable functions of  $V$  noted  $L^2(\Omega)$  [i.e.,  $\psi(V) \in L^2(\Omega)$ ], where the scalar product is defined as follows:

$$\langle \psi, \varphi \rangle = \int_{\Omega} \psi(V) \varphi(V) dV.$$

Therefore, the problem is reduced to an eigenvalue problem, and then to discussing the spectral nature of operator  $A$ .

It is to be noted that the above formulation of the scattering kernel problem, through the transformation (10), is especially convenient to solve the linearized form of the Boltzman equation (LBE).<sup>11,12</sup>

Assuming that the operator  $A$  has a purely discrete spectrum, its kernel  $K(V, V')$  can be written

$$K(V, V') = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^n \psi^n(V) \psi^n(V'), \tag{12}$$

where  $\psi^n(V) \in L^2(\Omega)$  is an eigenfunction of the operator  $A$  and  $\lambda^n$  is its corresponding eigenvalue. According to positivity and normalization conditions required in  $B(V', V)$ , the operator  $A$  must be non-negative and its eigenvalues satisfy  $\lambda^n \in [0, 1]$  for any  $n \in \mathbb{N}$ .

From now the eigenfunction  $\psi^n(V)$  is assumed to be in the form

$$\psi_r(V_x) \psi_l(V_y) \psi_m(V_z) = \prod_{j=1}^3 \psi_{k_j}(V_j).$$

Since the eigenfunction  $\psi^n(V)$  is a square summable function, we have  $\psi_{k_j}(V_j) \in L^2(\Omega_j)$ , where  $\Omega_j$  denotes the scalar space associated to  $V_j$ . Moreover, the family of the function set  $\psi_{k_j}(V_j)$ ,  $k_j \in \mathbb{N}$ , must be a function basis of the Hilbert space  $L^2(\Omega_j)$  [note that this assumption will lead immediately to the coming property (16)]. The eigenvalues of operator  $A$  become  $\lambda_{rlm}$ , and we can assume  $\lambda_{rlm} = \lambda_r \lambda_l \lambda_m$ , in respect to the respective scalar products in the different Hilbert spaces  $L^2(\Omega_j)$  and  $L^2(\Omega)$ . Finally, the expression (12) can be replaced by

$$K(V, V') = \sum_{r,l,m} \lambda_r \lambda_l \lambda_m \psi_r(V_x) \psi_l(V_y) \psi_m(V_z) \psi_r(V'_x) \psi_l(V'_y) \psi_m(V'_z). \tag{13}$$

The sum in the right member of (13) can be written as the product of three infinite sums:

$$K(V, V') = \prod_{j=1}^3 \sum_{k=0}^{\infty} \lambda_{k_j} \psi_{k_j}(V_j) \psi_{k_j}(V'_j). \tag{14}$$

Let us put

$$\psi_{0_x}(V_x) = \frac{\sqrt{2}}{C_w} |V_x|^{1/2} e^{-V_x^2/2C_w^2},$$

$$\psi_{0_y}(V_y) = (C_w \sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-V_y^2/2C_w^2},$$

$$\psi_{0_z}(V_z) = (C_w \sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-V_z^2/2C_w^2}.$$

Each of  $\psi_{0_j}(V_j)$  functions satisfies

$$\|\psi_{0_j}(V_j)\|_j^2 = \int_{\Omega_j} [\psi_{0_j}(V_j)]^2 dV_j = 1.$$

From the relation (4'), it may be deduced that the function  $\psi^0(V) = \psi_{0_x}(V_x) \psi_{0_y}(V_y) \psi_{0_z}(V_z)$  is an eigenfunction of operator  $A$ , associated to eigenvalue  $\lambda_{0_x} \lambda_{0_y} \lambda_{0_z} = 1$  (see demonstration in Appendix B). This first eigenfunction takes an important part in the solution of the problem because it corresponds to the maximal eigenvalue of  $A$ , and so leads to an equilibrium state. Indeed, in the equilibrium state between the gas and the wall, the most physically convenient scattering kernel is the complete accommodation kernel, which is assigned here to  $\psi^0(V)$ . Therefore any good model of a scattering kernel must converge to this equilibrium scattering kernel. This point matches the basic assumption founding the reciprocity relation which is that any scattering kernel must be valid when a thermodynamic equilibrium exists between the gas and the wall.

In agreement with the concept of three distinguishable degrees of freedom in the reflection process, we introduce three coefficients  $\alpha_j$ , related to the set of eigenvalues by  $\lambda_{0_j} = 1$  and  $\lambda_{k_j} = (1 - \alpha_j)$  for  $k \neq 0$  with  $\alpha_j \in [0, 1]$ ; relation (14) becomes

$$K(V, V') = \prod_{j=1}^3 \left( \psi_{0_j}(V_j) \psi_{0_j}(V'_j) + (1 - \alpha_j) \sum_{k=1}^{\infty} \psi_{k_j}(V_j) \psi_{k_j}(V'_j) \right), \quad (15)$$

which may be rewritten

$$K(V, V') = \prod_{j=1}^3 \left( \alpha_j \psi_{0_j}(V_j) \psi_{0_j}(V'_j) + (1 - \alpha_j) \sum_{k=0}^{\infty} \psi_{k_j}(V_j) \psi_{k_j}(V'_j) \right).$$

Finally, by using the following property,

$$\sum_{k=0}^{\infty} \psi_{k_j}(V_j) \psi_{k_j}(V'_j) = \delta(V_j - V'_j), \quad (16)$$

we obtain the result

$$K(V, V') = \prod_{j=1}^3 (\alpha_j \psi_{0_j}(V_j) \psi_{0_j}(V'_j) + (1 - \alpha_j) \delta(V_j - V'_j)). \quad (17)$$

By developing the product (17) we obtain  $K(V, V')$  as a sum of elementary operators as follows:

$$K(V, V') = \sum_{\kappa} \mu_{\kappa} K_{\kappa}(V, V'), \quad (18)$$

where  $\mu_{\kappa}$  is given again by the relations (9) of Sec. III, and where the elementary operators  $K_{\kappa}(V, V')$  are written below:

$$\begin{aligned} K_0(V, V') &= \delta(V_x - V'_x) \delta(V_y - V'_y) \delta(V_z - V'_z), \\ K_{yz}(V, V') &= \frac{1}{\pi C_w^2} \delta(V_x - V'_x) e^{-v_y^2/2C_w^2} e^{-v_z^2/2C_w^2} e^{-v_y'^2/2C_w^2} e^{-v_z'^2/2C_w^2}, \\ K_{xz}(V, V') &= \frac{2}{C_w^3 \sqrt{\pi}} |V_x V'_x|^{1/2} \delta(V_y - V'_y) e^{-v_x^2/2C_w^2} e^{-v_z^2/2C_w^2} e^{-v_x'^2/2C_w^2} e^{-v_z'^2/2C_w^2}, \\ K_{xy}(V, V') &= \frac{2}{C_w^3 \sqrt{\pi}} |V_x V'_x|^{1/2} \delta(V_z - V'_z) e^{-v_x^2/2C_w^2} e^{-v_y^2/2C_w^2} e^{-v_x'^2/2C_w^2} e^{-v_y'^2/2C_w^2}, \\ K_{xyz}(V, V') &= \frac{2}{\pi C_w^4} |V_x V'_x|^{1/2} e^{-v_x^2/2C_w^2} e^{-v_y^2/2C_w^2} e^{-v_z^2/2C_w^2} e^{-v_x'^2/2C_w^2} e^{-v_y'^2/2C_w^2} e^{-v_z'^2/2C_w^2}, \\ K_z(V, V') &= \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(V_x - V'_x) \delta(V_y - V'_y) e^{-v_z^2/2C_w^2} e^{-v_z'^2/2C_w^2}, \\ K_y(V, V') &= \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(V_x - V'_x) \delta(V_z - V'_z) e^{-v_y^2/2C_w^2} e^{-v_y'^2/2C_w^2}, \end{aligned} \quad (19)$$

$$K_x(V, V') = \frac{2}{C_w^2} |V_x V'_x|^{1/2} \delta(V_y - V'_y) \delta(V_z - V'_z) e^{-V_x^2/2C_w^2} e^{-V'^2_x/2C_w^2}.$$

It is easy to verify that the elementary operators  $K_\kappa(V, V')$  given above correspond to the elementary kernels  $B_\kappa(V', V)$  given in Sec. III, through transformation (10); so the complete operator  $K(V, V')$  obtained from relation (18) corresponds exactly to the scattering kernel given by relation (7).

Referring now directly to Eqs. (15) and (13), it is clear that our choice corresponds to a spectral expansion of  $K(V, V')$  involving eight different eigenvalues, namely, 1,  $(1 - \alpha_x)$ ,  $(1 - \alpha_y)$ ,  $(1 - \alpha_z)$ ,  $(1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y)$ ,  $(1 - \alpha_x)(1 - \alpha_z)$ ,  $(1 - \alpha_y)(1 - \alpha_z)$ ,  $(1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y) \times (1 - \alpha_z)$ . Of course this choice also corresponds to a degeneracy of the eigenfunction space associated to each eigenvalue, except for the maximum eigenvalue; therefore, as shown above, it is not necessary to specify the eigenfunctions.

As is well known, the classical CL model and its extensions by Lord<sup>13,14</sup> to polyatomic molecules are derived from another procedure based on a more general relation:<sup>12</sup>

$$K(V, V') = \sum_{n,m=0}^{\infty} \lambda^{nm} \varphi^n(V) \varphi^m(V'), \tag{20}$$

where the  $\varphi^k$  function is specified. As it can be seen, kernels built on this general form could not automatically insure the properties listed above for good scattering kernels (i.e., positivity, normalization, and reciprocity properties).<sup>12</sup> Moreover, in these CL scattering kernel models the normal and the tangential components of the velocity of the molecule colliding with the wall are considered as independent, and then the scattering kernel is written separately in normal and tangential parts. This aspect of the CL models was recently criticized as not allowing interplay between the various components of the impinging particle velocity.<sup>5</sup>

### V. RELATIONS WITH ACCOMMODATION COEFFICIENTS

In this section the physical meaning of the parameters involved in the kernel is clarified. So doing, we prove that the  $\alpha_j$  coefficients respectively equal the accommodation coefficients  $\beta_j$  of the momentum components.

First  $\mu_\kappa$  may be easily shown to represent the weight of particles reflected according to the process  $\kappa$  in the flux of reflected particles. This property appears obvious when integrating the two members of Eq. (3) over the reflected velocity range, using  $B(V', V)$  expressions given in relations (7) and (9). Moreover, the scattering is built using three independent coefficients  $\alpha_j$ : then it can be seen that taking into account condition (8), the  $\mu_\kappa$  coefficients are necessarily given by relations (9).

On the other hand, the momentum accommodation coefficients  $\beta_j$  are defined as<sup>9</sup>

$$\beta_j = \frac{\Phi_j^- - \Phi_j^+}{\Phi_j^- - \Phi_j^e}. \tag{21}$$

where  $\Phi_j^-$  is the incoming flux at the wall of the momentum  $j$  component,  $\Phi_j^+$  is the corresponding reflected flux, and  $\Phi_j^e$  is the reflected flux in the hypothetical situation of perfect accommodation to the wall. These various momentum fluxes may be written for each component:

$$\begin{aligned} \Phi_j^- &= \int_{\Omega'} m |V'_x| V'_j f^-(V') d_{V'}, \\ \Phi_j^+ &= \int_{\Omega} m |V_x| V_j f^+(V) d_V, \end{aligned} \tag{22}$$

where  $f^-(V)$  and  $f^+(V)$  are respectively the incident and the reflected distribution function. Remembering that  $f^+(V)$  is given by (3) and using expression (7) of  $B(V', V)$ ,  $\Phi_j^+$  is written

$$\Phi_j^+ = \int_{\Omega'} m|V'_x|f^-(V') \sum_{\kappa} \mu_{\kappa} \left( \int_{\Omega} V_j B_{\kappa}(V', V) d_V \right) d_{V'} . \tag{23}$$

And  $\Phi_j^e$  for total perfect accommodation (i.e.,  $\alpha_x = \alpha_x = \alpha_x = 1$ ) is written

$$\Phi_j^e = \int_{\Omega'} m|V'_x|f^-(V') \left( \int_{\Omega} V_j B_{xyz}(V', V) d_V \right) d_{V'} . \tag{24}$$

**A. Calculation of  $\beta_y$  and  $\beta_z$**

First the case  $V_j = V_y$  is dealt with.

According to the expression of  $B_{xyz}(V', V)$ ,  $V_y B_{xyz}(V', V)$  is an odd function of the  $V_y$  component, therefore,

$$\int_{\Omega} V_y B_{xyz}(V', V) d_V = 0$$

and then  $\Phi^e = 0$ , so we can write

$$\beta_y = 1 - \frac{\Phi_y^+}{\Phi_y^-} .$$

On the other hand, looking at relation (23), the contribution of each partial kernel  $B_{\kappa}(V', V)$  in  $\Phi_y^+$  expression can be estimated separately by

$$\int_{\Omega} V_y B_{\kappa}(V', V) d_V .$$

Each of these partial integrals can be calculated easily and give for any  $\kappa$  either 0 or  $V'_y$ . As a result we obtain

$$\sum_{\kappa} \mu_{\kappa} \int_{\Omega} V_y B_{\kappa}(V', V) d_V = V'_y (\mu_0 + \mu_x + \mu_z + \mu_{xz}) ,$$

and

$$\Phi_j^+ = (\mu_0 + \mu_x + \mu_z + \mu_{xz}) \Phi_j^- .$$

It results directly that

$$\beta_y = 1 - (\mu_0 + \mu_x + \mu_z + \mu_{xz}) ,$$

which, according to the normalization condition (8), is also equal to

$$\beta_y = \mu_y + \mu_{xy} + \mu_{yz} + \mu_{xyz} . \tag{25}$$

Similarly we obtain for  $\beta_z$

$$\beta_z = \mu_z + \mu_{xz} + \mu_{yz} + \mu_{xyz} . \tag{26}$$

By using the  $\mu_{\kappa}$  expressions given by relations (9), Eqs. (25) and (26) lead to

$$\beta_y = \alpha_y \tag{27}$$

and

$$\beta_z = \alpha_z. \tag{28}$$

**B. Calculation of  $\beta_x$**

Now  $V_j = V_x$  is considered.

Using the same definition of the various fluxes with respect to the sign of the incident flux, we can write

$$\Phi_x^- = \int_{\Omega'} m V_x'^2 f^-(V') dV'. \tag{29}$$

The calculation of the partial integrals involved in relation (23),

$$\int_{\Omega} V_x B_{\kappa}(V', V) dV,$$

gives in this case either  $-V_x'$  or  $C_w \sqrt{\pi}/2$  for any  $\kappa$ . As a result we obtain

$$\sum_{\kappa} \mu_{\kappa} \int_{\Omega} V_x B_{\kappa}(V', V) dV = -V_x'(\mu_0 + \mu_y + \mu_z + \mu_{yz}) + \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2}(\mu_x + \mu_{xy} + \mu_{xz} + \mu_{xyz}).$$

Using the flux expressions (29) and (23), this result leads to

$$\Phi_x^- - \Phi_x^+ = (1 - (\mu_0 + \mu_y + \mu_z + \mu_{yz}))\Phi_x^- - \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2}(\mu_x + \mu_{xy} + \mu_{xz} + \mu_{xyz}) \int_{\Omega'} m |V_x'| f^-(V') dV'.$$

We also have

$$\int_{\Omega} V_x B_{xyz}(V', V) dV = \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2}$$

and so

$$\Phi_x^- - \Phi_x^e = \Phi_x^- - \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2} \int_{\Omega'} m |V_x'| f^-(V') dV'.$$

Consequently, remembering condition (8), it results that

$$\beta_x = \mu_x + \mu_{xy} + \mu_{xz} + \mu_{xyz}. \tag{30}$$

Replacing  $\mu_{\kappa}$  by relations (9) once more, the result shows

$$\beta_x = \alpha_x.$$

The classical Maxwell model predicted the same value of the various accommodation coefficients.<sup>9</sup> However it is well-known, notably from the measurements of accommodation coefficients by various procedures,<sup>15-17</sup> that these coefficients do not have the same value; and this description of equivalent accommodation is not physically consistent.<sup>18</sup> In the new model we can see that the three parameters introduced in the theoretical modelling equal the three accommodation coefficients of momentum component fluxes which are basically different.

## VI. EXTENSION OF THE NEW MODEL TO POLYATOMIC GASES

In polyatomic gases the internal state of a molecule is characterized by the rotational and vibrational energies,  $E_{ir}$  and  $E_{iv}$ , and depends on quantum numbers  $ir$  and  $iv$ . In addition, because of the degeneracy of rotational levels, a weight factor ( $g_{ir}=2ir+1$ ) is involved in the distribution function expression. The distribution functions of impinging and emerging particles are linked by the following relation [generalizing relation (3)]:<sup>9,19</sup>

$$\begin{aligned} & V_x f_i^+(V, E_{ir}, g_{ir}, E_{iv}) \\ &= \sum_{ir', iv'} \int_{\Omega'} |V'_x| f^-(V', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}) P_G(V', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}, V, E_{ir}, g_{ir}, E_{iv}) dV', \end{aligned} \quad (31)$$

where  $P_G(V', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}, V, E_{ir}, g_{ir}, E_{iv})$  is the generalized scattering kernel for molecules considered with internal modes. Of course normalization and non-negative conditions are easily generalized to

$$\sum_{ir', iv'} \int_{\Omega} P_G(V', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}, V, E_{ir}, g_{ir}, E_{iv}) dV = 1 \quad (32)$$

and

$$P_G(V', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}, V, E_{ir}, g_{ir}, E_{iv}) \geq 0. \quad (33)$$

Furthermore, for the reciprocity condition, we admit the form given by Kuscer<sup>9</sup> which, excluding external magnetic fields, assumes the form

$$\begin{aligned} & |V'_x| e^{-\|V'\|^2/C_w^2} e^{-\varepsilon_{ir'}} e^{-\varepsilon_{iv'}} (2ir'+1) P_G(V', E_{ir'}, E_{iv'}, V, E_{ir}, E_{iv}) \\ &= V_x e^{-\|V\|^2/C_w^2} e^{-\varepsilon_{ir}} e^{-\varepsilon_{iv}} (2ir+1) P_G(-V, E_{ir}, E_{iv}, -V', E_{ir'}, E_{iv'}), \end{aligned} \quad (34)$$

with

$$\varepsilon_{ir} = \frac{E_{ir}}{kT_w}, \quad \varepsilon_{iv} = \frac{E_{iv}}{kT_w}. \quad (35)$$

Reference 19 presents, phenomenologically, a scattering kernel  $P$  characterizing the interaction of diatomic molecules with internal modes at the wall (this kernel  $P$  is recalled in Appendix C). In kernel  $P$  the translation mode was taken as a whole (without interplay between the three translational degrees of freedom), so, when applied to unstructured molecules,  $P$  reduced to a classical Maxwell kernel. Nevertheless, a partial accommodation concept was employed in the  $P$  derivation allowing different accommodations of the various modes (translation, rotation, vibration). In fact, this concept was analogous to those used in the new model to disconnect the three translation degrees in the accommodation process. From Ref. 19,  $P$  may be immediately rewritten:

$$\begin{aligned} P = & \left( (1 - \alpha_\theta) \delta(V - V'_R) + \alpha_\theta \frac{2}{C_w^4 \pi} V_x e^{-V^2/C_w^2} \right) \left( (1 - \alpha_r)(1 - \alpha_v) \tilde{P}_0 + \alpha_v(1 - \alpha_r) \tilde{P}_v \right. \\ & \left. + \alpha_r(1 - \alpha_v) \tilde{P}_r + \alpha_v \alpha_r \tilde{P}_{rv} \right), \end{aligned} \quad (36)$$

where  $\alpha_\theta$ ,  $\alpha_v$  and  $\alpha_r$  are real parameters independent of the microscopic state of the molecules and are considered in  $[0,1]$ , and



$$\begin{aligned} \tilde{P}_0 &= \delta(E_{ir'} - E_{ir}) \delta(E_{iv'} - E_{iv}), \quad \tilde{P}_{rv} = \frac{e^{-\varepsilon_{ir}}}{Q_r} (2i_r + 1) \frac{e^{-\varepsilon_{iv}}}{Q_v}, \\ \tilde{P}_v &= \delta(E_{ir'} - E_{ir}) \frac{e^{-\varepsilon_{iv}}}{Q_v}, \quad \tilde{P}_r = \frac{e^{-\varepsilon_{ir}}}{Q_r} (2ir + 1) \delta(E_{iv'} - E_{iv}). \end{aligned}$$

The quantities  $Q_v$  and  $Q_r$  involved in  $\tilde{P}_\chi$  ( $\chi = v, r, rv$ ) are the partition functions defined at the wall temperature:

$$Q_r = \sum_{iv} (2ir + 1) e^{-\varepsilon_{ir}}, \quad Q_v = \sum_{iv} e^{-\varepsilon_{iv}}.$$

Now, in operator  $P$  in (36), let us replace the first parenthesis corresponding to the classical Maxwell scattering kernel by the new kernel proposed in relation (7) and (9). So a general scattering kernel is obtain in the form

$$P_G = \left( \sum_{\kappa} \mu_{\kappa}^* B_{\kappa}(V', V) \right) \left( (1 - \alpha_r)(1 - \alpha_v) \tilde{P}_0 + \alpha_v(1 - \alpha_r) \tilde{P}_v + \alpha_r(1 - \alpha_v) \tilde{P}_r + \alpha_v \alpha_r \tilde{P}_{rv} \right), \tag{37}$$

where the  $\mu_{\kappa}^*$  are expressed by relations (9) using the directional parameters  $\alpha_x^*$ ,  $\alpha_y^*$ , and  $\alpha_z^*$ . The superscript (\*) is used to indicate that the physical meaning of the three parameters is not yet shown in the polyatomic modeling frame.

Considering the properties of its parts,  $P_G$  visibly satisfies the normalization and non-negativity conditions. Furthermore,  $P_G$  is a sum of partial operators assuming the factorized form  $\tilde{P}_{\chi} B_{\kappa}$  (where  $\chi$  refers to the internal accommodation process). It is clear that the  $B_{\kappa}$  satisfying condition (4) implies that  $\tilde{P}_{\chi} B_{\kappa}$  satisfies the generalized reciprocity condition (34). Consequently,  $P_G$  also satisfies (34) as a linear combination of  $\tilde{P}_j B_{\kappa}$  terms. So a good anisotropic scattering kernel  $P_G$  has been obtained phenomenologically.

Furthermore, in relation (37) the part in the first parenthesis of the second member concerns the translation mode. Introducing into it  $\alpha_{\theta}$  defined as  $\alpha_{\theta} = 1 - \mu_0^* = \sum_{\kappa \neq 0} \mu_{\kappa}^*$ , this part assumes the form

$$P_G = (1 - \alpha_{\theta}) \delta(V - V'_R) + \alpha_{\theta} \sum_{\kappa \neq 0} \lambda_{\kappa}^* B_{\kappa}(V', V), \tag{38}$$

where

$$\lambda_{\kappa}^* = \frac{\mu_{\kappa}^*}{\alpha_{\theta}}, \quad \sum_{\kappa \neq 0} \lambda_{\kappa}^* = 1. \tag{39}$$

In this last form the complete specular reflection appears separately from all the processes in which partial or complete accommodation occurs.

Integrating on velocity and summing over quantum numbers on the left and right sides of Eq. (31), it is easily shown that  $\mu_{\kappa}^*$  represents (as  $\mu_{\kappa}$  for the unstructured molecules) the part of the particle flux reflected according to the directional process  $\kappa$ . The analytical systematic derivation of  $P_G$  and further physical interpretation of  $\alpha_x^*$ ,  $\alpha_y^*$ ,  $\alpha_z^*$ ,  $\alpha_v$ ,  $\alpha_r$ , and  $\alpha_{\theta}$  will be presented in a subsequent study.

Regarding now the process from the point of view of energy transfer, the comments given in Ref. 19 can be extended. The thermal kinetic energy of the particle flow may be exchanged in collisions at the wall: at the statistical level the specular kernels reflect the effect of elastic collisions at the wall for the translational mode, while diffusive kernels represent the effects of inelastic collisions for this same mode. In the present model the influence of these inelastic

collisions is considered independently for each translational degree (i.e., for each direction). Statistically the scattered distribution function is no longer accommodated in the same way according to the normal and tangential directions: and on the microscopic level this means that the kinetic energy transfers of an impinging molecule change according to its velocity direction with respect to the wall.

In the same manner the three energy modes may interplay when exchanging energy at the wall, and, so, in operators  $\tilde{P}_0$ ,  $\tilde{P}_r$ ,  $\tilde{P}_v$ , and  $\tilde{P}_{rv}$  the effects of elastic or inelastic collisions for each internal mode appear independently.

## VII. DISCUSSION

The new model proposed in this article presents many aspects which allow realistic gas surface interactions to be described. First, the model takes into account the anisotropic effects in the interacting process at the wall. This anisotropic character of the surface derives basically from its physical properties and/or from its suitable treatment. Consequently the real physical properties of the wall are embedded in the three accommodation coefficients of the momentum components. Existing models rarely involve three directional parameters as the present model does: the former approaches using a three parameter representation<sup>2,20</sup> are based on the suggestion of a shifted Maxwellian to describe the reemitted distribution function of a monatomic gas from a solid surface and the parameters are arbitrary constants.<sup>21</sup> Here the new model gives an anisotropic description of the interaction in the sense employed by Kuscer<sup>9</sup> i.e., the new kernel operator is no longer invariant under rotation about the normal axis at the solid surface; moreover, in the new model the parameters are shown to be the accommodation coefficients themselves so it is possible to relate them to physical measurements.<sup>15–18,22</sup> In addition, in polyatomic cases, the present model allows independent accommodation processes at the wall for the various energy modes which seems a realistic description if, for example, the very different situations occurring at the wall for vibrational or translational accommodation are kept in mind.<sup>23,24</sup> Then, it is to be noted that the present model also appears as an improvement with respect to two well-known criticisms opposed to the methods based on the scattering kernel concept. The first criticism formulated by Cercignani<sup>3</sup> concerns the Maxwellian-type kernel: for a given monochromatic beam this model predicts a sharp maximum in the number of molecules at the angle corresponding to specular reflection, which is contradicted by experiments;<sup>25</sup> it is clear that this maximum is smoothed in the new model [see relation (38)]. The second criticism recently formulated by Bruno *et al.*,<sup>5</sup> is not completely justified because it is based, in a part, on studies of reactive or dissociated flows, and, as is well-known, the scattering kernel modeling cannot give correct results in such a case because of the assumption of the wall impermeability involved in it. But, on the other hand, the comments of the authors requiring the introduction of interplay between the velocity directions and the various energy modes is, in our opinion, completely justified. In the present model, precisely such an interplay is present, and the separating procedure of velocity components, which appears in the CL models<sup>3</sup> (also when extended to internal modes<sup>13,14,26</sup>) is not employed here.

A final argument in defense of the new model is its simplicity: as seen above the physical interpretation of the various parts of the kernel is straightforward. Moreover, the model is easy-to-use: first the calculations are simplified because the kernel only depends on the reflected microscopic space parameters; then, from the account of different kinds of accommodation of the moment components a preponderant weight can be given to a particular accommodation process, so the model may be easily simplified according to the geometrical symmetry or the physical conditions of the problem.

## VIII. CONCLUDING REMARKS

We have derived an anisotropic model of a scattering kernel. For the unstructured molecules, three directional parameters involved in the model have been shown to be equal to the accommodation coefficients of the fluxes of the momentum components at the wall.

We have also extended the new model to polyatomic structured molecules. In this domain only a phenomenological derivation has been presented. The corresponding analytical method and further calculations to relate parameters  $\alpha_x^*$ ,  $\alpha_y^*$ ,  $\alpha_z^*$ ,  $\alpha_v$ ,  $\alpha_r$ ,  $\alpha_\theta$  to the accommodation coefficients  $\beta_j$  of momentum fluxes and to accommodation coefficients of the energy fluxes will be presented in a subsequent study. These relationships are not expected to be very simple, especially because the constant parameters introduced in the model refer to direct exchanges between each molecular mode and the wall, while the energy accommodation coefficients involve direct exchange with the wall for each mode and also intermode exchanges. Finally, even if not yet confirmed in applications, many arguments have been developed, showing the consistency, physical pertinence and usefulness of the new scattering kernel.

**APPENDIX A:  $B_\kappa(V', V)$  SATISFIES THE RECIPROcity RELATION**

The property for operator  $B_{zy}$  is demonstrated. For the rest of the operators the demonstrations are similar:

$$|V'_x|f_0(V')B_{zy}(V', V) = |V'_x| \frac{n}{(C_w\sqrt{\pi})^3} e^{-\|V'\|^2/C_w^2} \frac{1}{\pi C_w^2} \delta(V_x + V'_x) e^{-V_y^2/C_w^2} e^{-V_z^2/C_w^2},$$

and

$$|V_x|f_0(-V)B_{zy}(-V, -V') = |V_x| \frac{n}{(C_w\sqrt{\pi})^3} e^{-\|V\|^2/C_w^2} \frac{1}{\pi C_w^2} \delta(V_x + V'_x) e^{-V_y^2/C_w^2} e^{-V_z^2/C_w^2}.$$

In these two expressions, there appear the same terms in  $y$  and  $z$ ; the full equality of both the expressions comes from the property of the Dirac function.

**APPENDIX B:  $\psi^0$  AS AN EIGENFUNCTION OF OPERATOR A**

$$A(\psi^0) = \int_{\Omega'} [|V'_x|f_0(V')]^{1/2} [|V_x|f_0(V)]^{-1/2} B(V'_R, V) \psi^0(V') dV'.$$

Replacing  $\psi^0$  and  $f_0(V)$  by their expression in this integral:  $\psi^0 = (\sqrt{2}/C_w\sqrt{\pi}) |V_x|^{1/2} e^{-\|V\|^2/2C_w^2}$  and  $f_0(V) = (n/(C_w\sqrt{\pi})^3) e^{-\|V\|^2/C_w^2}$ , it is found

$$A(\psi^0) = \frac{\sqrt{2}}{C_w\sqrt{\pi}} \int_{\Omega'} |V_x|^{-1/2} |V'_x| e^{\|V\|^2/2C_w^2} e^{-\|V'\|^2/C_w^2} B(V'_R, V) dV'.$$

The reciprocity relation (4') leads to

$$\int_{\Omega'} |V'_x| e^{-\|V'\|^2/C_w^2} B(V'_R, V) dV' = |V_x| e^{-\|V\|^2/C_w^2},$$

and, consequently,

$$A(\psi^0) = \frac{\sqrt{2}}{C_w\sqrt{\pi}} |V_x|^{1/2} e^{-\|V\|^2/2C_w^2} = \psi^0.$$

**APPENDIX C: KERNEL OPERATOR OF REF. 19**

The full scattering kernel of Ref. 19 is given by

$$P = (1 - \alpha_\theta)(1 - \alpha_r)(1 - \alpha_v)P_1 + (1 - \alpha_\theta)(1 - \alpha_r)\alpha_v P_2 + (1 - \alpha_\theta)\alpha_r(1 - \alpha_v)P_3 + (1 - \alpha_\theta) \\ \times \alpha_r\alpha_v P_4 + \alpha_\theta(1 - \alpha_r)(1 - \alpha_v)P_5 + \alpha_\theta\alpha_r(1 - \alpha_v)P_6 + \alpha_\theta(1 - \alpha_r)\alpha_v P_7 + \alpha_\theta\alpha_r\alpha_v P_8,$$

where  $\alpha_\theta, \alpha_r, \alpha_v$  are real parameters independent of the microscopic state of the molecules. The specular operators with elastic and inelastic parts for each internal mode are given by

$$P_1 = \delta(V' - V_R) \delta(E'_{ir} - E_r) \delta(E'_{iv} - E_v), \\ P_2 = \delta(V' - V_R) \delta(E'_{ir} - E_r) \frac{e^{-\varepsilon_{iv,w}}}{Q_{v,w}}, \\ P_3 = \delta(V' - V_R) \frac{e^{-\varepsilon_{ir,w}}}{Q_{r,w}} (2ir + 1) \delta(E'_{iv} - E_v), \\ P_4 = \delta(V' - V_R) \frac{e^{-\varepsilon_{ir,w}}}{Q_{r,w}} (2ir + 1) \frac{e^{-\varepsilon_{iv,w}}}{Q_{v,w}}.$$

The diffusive operators with elastic and inelastic parts, for each internal mode, are given by

$$P_5 = \frac{2}{\pi C_w^4} V_x e^{-v_w^2} \delta(E_{ir} - E'_{ir}) \delta(E_{iv} - E'_{iv}), \\ P_6 = \frac{2}{\pi C_w^4} V_x e^{-v_w^2} \frac{e^{-\varepsilon_{ir,w}}}{Q_{r,w}} (2ir + 1) \delta(E_{iv} - E'_{iv}), \\ P_7 = \frac{2}{\pi C_w^4} V_x e^{-v_w^2} \delta(E_{ir} - E'_{ir}) \frac{e^{-\varepsilon_{iv,w}}}{Q_{v,w}}, \\ P_8 = \frac{2}{\pi C_w^4} V_x e^{-v_w^2} \frac{e^{-\varepsilon_{ir,w}}}{Q_{r,w}} (2ir + 1) \frac{e^{-\varepsilon_{iv,w}}}{Q_{v,w}},$$

with

$$\frac{1}{C_w^4} = \left( \frac{m}{2kT_w} \right)^2.$$

In Ref. 19,  $E_r$  and  $E_v$  defined as mean energy per molecule have been used by error. The correct parameters to use anywhere in this reference are  $E_{ir}$  and  $E_{iv}$ .

- <sup>1</sup>J. C. Maxwell, *Philos. Trans. R. Soc. London* **170**, 231 (1878).
- <sup>2</sup>S. F. Shen, *Entropie* **18**, 138 (1967).
- <sup>3</sup>C. Cercignani and M. Lampis, *Transp. Theory Stat. Phys.* **1**, 101 (1971).
- <sup>4</sup>C. Cercignani and M. Lampis, *AIAA J.* **35**, 1000 (1997).
- <sup>5</sup>D. Bruno, M. Cacciatore, S. Longo, and M. Rutigliano, *Chem. Phys. Lett.* **320**, 245 (2000).
- <sup>6</sup>R. Monaco, *Introduction à la théorie et aux applications de l'interaction gaz-paroi en théorie cinétique des gaz*, Dipartimento di Matematica Politecnico Torino, Torino-Corso, libreria editrice universitaria levrotto and bella ed. (1986).
- <sup>7</sup>C. Cercignani, *Theory and Application of the Boltzmann Equation* (Scottish Academic, Edinburgh, 1975).
- <sup>8</sup>S. Chapman and T. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, 3rd ed. (Cambridge Mathematical Library, Cambridge, 1970).
- <sup>9</sup>I. Kuscer, in *International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Gottingen, 1974, Vol. E1, pp. 1–21.
- <sup>10</sup>F. Sharipov, *Eur. J. Mech. B/Fluids* **21**, 113 (2002).
- <sup>11</sup>C. Cercignani, *J. Stat. Phys.* **1**, 297 (1969).
- <sup>12</sup>C. Cercignani, *Mathematical Methods in Kinetic Theory*, 2nd ed. (Plenum, New York, 1990), Chap. 4, p. 98.
- <sup>13</sup>R. G. Lord, *Phys. Fluids A* **3**, 706 (1991).
- <sup>14</sup>R. G. Lord, *Phys. Fluids* **7**, 1159 (1995).

- <sup>15</sup>R. K. Hason, *Phys. Fluids* **16**, 369 (1973).
- <sup>16</sup>I. Larina and V. Rykov, *15th Rarefied Gas Dynamics International Symposium*, Teubner, 1986, p. 635.
- <sup>17</sup>M. Seidl and E. Steinheil, *Rarefied Gas Dyn.* **9**, E9.1 (1974).
- <sup>18</sup>F. Goodman, *Phys. Rev. A* **68**, 013403 (2003).
- <sup>19</sup>J. G. Méolans and L. Aufrère, *C. R. Acad. Sci. Paris, Méc. fluides* **329**, 201 (2001).
- <sup>20</sup>C. Cercignani and M. Lampis, *Mech. Res. Commun.* **26**, 451 (1999).
- <sup>21</sup>S. Nocilla, in *3rd Rarefied Gas Dynamics International Symposium*, Aachen, edited by J. Laurman (1963).
- <sup>22</sup>E. B. Arkilic, K. S. Breuer, and M. A. Schmidt, *J. Fluid Mech.* **437**, 29 (2001).
- <sup>23</sup>J. G. Méolans and I. A. Graur, *23rd International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, Whistler, British Columbia, Canada, 2002.
- <sup>24</sup>J. G. Méolans, *Mech. Res. Commun.* **30**, 629 (2003).
- <sup>25</sup>J. J. Hinchey and W. M. Foley, *Rarefied Gas Dyn.* **2**, 505 (1966).
- <sup>26</sup>R. G. Lord, in *17th Rarefied Gas Dynamics International Symposium*, Aachen, edited by E. Alfred (Beylich, 1990).

## Scattering kernel for polyatomic molecules

J. Gilbert Méolans<sup>a)</sup> and S. Kokou Dadzie<sup>b)</sup>

*Université de Provence, UMR CNRS 6595, Département de Mécanique  
Energétique, 5 rue Enrico Fermi 13453, Marseille Cedex 13, France*

(Received 8 July 2004; accepted 11 March 2005; published online 12 May 2005)

A polyatomic scattering kernel phenomenologically presented in a previous paper is derived from an integral operator formulation. The five parameters involved in the scattering kernel expression are shown to be equal to the accommodation coefficients of various fluxes at the wall, namely, the fluxes of the three components of the momentum and the fluxes of the rotational and vibrational energies of molecules. Under its present form the model is especially convenient for the diatomic molecules. © 2005 American Institute of Physics. [DOI: 10.1063/1.1904703]

### I. INTRODUCTION

During the last 20 years a need of new knowledge appeared concerning the interaction of gases with solid surfaces in order to formulate realistic boundary conditions in rarefied gas dynamics.<sup>1-4</sup> In spatial research the challenge was especially to predict correct heat fluxes and drag forces on engines reentering in planetary atmospheres. With the recent developments of the gaseous microflows, where the flow fields are characterized by moderately high Knudsen numbers, this topic acquired still more interest. This paper is devoted to the derivation of realistic laws linking the distribution functions of the reflected and the incoming particles at the wall. As it is well known such laws may be used as boundary conditions in order to resolve the Boltzmann equation. Moreover, in the slip regime, these laws also allow us to obtain more accurate velocity slip and temperature jumps at the wall, so the validity domain of the continuum equations is extended up to higher Knudsen numbers when these equations are associated to the correct boundary conditions.

In a previous paper<sup>5</sup> we developed a model of a scattering kernel for unstructured molecules using an integral operator formulation as illustrated by Cercignani.<sup>6,7</sup> At the end of this previous work the proposed scattering kernel was extended to the case of molecules with internal structure on the basis of brief phenomenological arguments. In the present paper, the integral operator formulation is generalized to a polyatomic gas, then the polyatomic scattering kernel is methodologically derived from the study of an eigenvalue equation and the meaning of the five parameters introduced in the kernel is clarified.

In Sec. II we deduced the polyatomic scattering kernel, investigating the associated integral operator. In its fully developed form the scattering kernel appears as a linear combination of 32 partial kernels declining all the possible associations of, respectively, diffusive and specular processes (according to three directions) and elastic or inelastic processes (for the internal modes). The 32 coefficients of this combination are the weight of the various accommodation processes and they depend on five basic parameters. These five parameters are shown to be, respectively, equal to the accommodation coefficients of the momentum components and of the internal energies. In Sec. III, we present a general comment on this method of integral operator in the framework of scattering kernel derivation.

<sup>a)</sup>Electronic mail: gilbert.meolans@polytech.univ-mrs.fr

<sup>b)</sup>Electronic mail: kokou.dadzie@polytech.univ-mrs.fr; URL: <http://www.polytech.univ-mrs.fr>

## II. POLYATOMIC SCATTERING KERNEL DERIVATION

We consider the problem of finding the scattering kernel,

$$B(V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}, V, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}),$$

governing the reflection of polyatomic molecules at the wall.  $V'$  is the velocity of the impinging gas particle referred to the wall,  $V' = (V'_x, V'_y, V'_z) \in \{\Omega' = \Omega'_x \times \Omega'_y \times \Omega'_z = \mathbb{R}_- \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}\}$  and  $V$  the velocity of the reflected one referred to the wall,  $V = (V_x, V_y, V_z) \in \{\Omega = \Omega_x \times \Omega_y \times \Omega_z = \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}\}$ . These velocities reduce to the peculiar velocities when the slip velocity at the wall is neglected.  $V_R$  is defined as  $V_R = (-V_x, V_y, V_z)$ , and  $(x, y, z)$  are the three spatial coordinates with  $x$  the normal axis to the wall oriented from the wall towards the gas.  $E_{ir'}$  and  $E_{iv'}$  are, respectively, the rotational energy and the vibrational energy of an incident particle at the wall. Similarly  $E_{ir}$  and  $E_{iv}$  are, respectively, the rotational energy and the vibrational energy of a reflected particle at the wall. Then the subscripts  $ir$  and  $iv$  are the quantum numbers related to the internal energy of a particle, hence they are integers;  $g_{ir}$  is the weight of the rotational degeneracy and will be taken here equal to  $(2ir+1)$ . The kernel  $B$ , which is the density of probability that a molecule in a state  $(V', E_{ir'}, E_{iv'})$  hitting the wall at any point  $X$  of the wall is reflected at the same point in a state  $(V, E_{ir}, E_{iv})$ , must satisfy the following conditions detailed in Ref. 5:<sup>1-3</sup> the non-negativity,

$$B(V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}, V, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}) \geq 0, \quad (1)$$

the normalization,

$$\sum_{ir, iv} \int_{\Omega} B(V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}, V, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}) dV = 1, \quad (2)$$

and the reciprocity relation,

$$\begin{aligned} & |V'_x| e^{-\|V'\|^2/C_w^2} e^{-\varepsilon_{ir'}} e^{-\varepsilon_{iv'}} g_{ir'} B(V', E_{ir'}, E_{iv'}, V, E_{ir}, E_{iv}) \\ &= V_x e^{-\|V\|^2/C_w^2} e^{-\varepsilon_{ir}} e^{-\varepsilon_{iv}} g_{ir} B(-V, E_{ir}, E_{iv}, -V', E_{ir'}, E_{iv'}), \end{aligned} \quad (3)$$

where

$$\varepsilon_{ir} = \frac{E_{ir}}{kT_w}, \quad \varepsilon_{iv} = \frac{E_{iv}}{kT_w} \quad (4)$$

with  $k$  the Boltzmann constant and  $T_w$  the wall temperature.

### A. Analytical derivation from integral operator

Let us write the transformation

$$\begin{aligned} K(V, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}, V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) &= [|V'_x| f_0(V', E_{ir'}, E_{iv'})]^{1/2} [|V_x| f_0(V, E_{ir}, E_{iv})]^{-1/2} \\ &\quad \times B(V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}, V, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}), \end{aligned} \quad (5)$$

where  $f_0(V, E_{ir}, E_{iv})$  is the local equilibrium distribution function at the temperature  $T_w$  of the wall, defined by

$$f_0(V, E_{ir}, E_{iv}) = \frac{n}{(C_w \sqrt{\pi})^3} e^{-\|V\|^2/C_w^2} g_{ir} e^{-\varepsilon_{ir}} e^{-\varepsilon_{iv}} \quad (6)$$

with

$$Q_r = \sum_{ir} g_{ir} e^{-\varepsilon_{ir}}, \quad Q_v = \sum_{iv} e^{-\varepsilon_{iv}}, \quad C_w^2 = \frac{2kT_w}{m}. \quad (7)$$

Since  $f_0$  is a known function the problem of finding  $B$  is equivalent to finding  $K$ . The normalization condition and the non-negativity conditions on  $B$  imply obviously the same conditions on  $K$ .

Note  $F_r$  the set of the rotational energy states  $E_{ir}$ , and  $F_v$  the set of the vibrational energy states  $E_{iv}$ . Consider the five elementary Hilbert spaces of states  $L^2(\Omega_\kappa)_{\kappa=x,y,z}$ ,  $L^2(F_r)$ , and  $L^2(F_v)$  of square summable functions with their corresponding usual scalar product

$$\langle \varphi_{\kappa 1}, \varphi_{\kappa 2} \rangle_\kappa = \int_{\Omega_\kappa} \varphi_{\kappa 1}(V) \varphi_{\kappa 2}(V) dV \quad \text{for all } \varphi_{\kappa 1}, \varphi_{\kappa 2} \in L^2(\Omega_\kappa), \quad \kappa = x, y, z,$$

$$\langle \varphi_{r 1}, \varphi_{r 2} \rangle_r = \sum_{ir} \varphi_{r 1}(E_{ir}) \varphi_{r 2}(E_{ir}) \quad \text{for all } \varphi_{r 1}, \varphi_{r 2} \in L^2(F_r),$$

$$\langle \varphi_{v 1}, \varphi_{v 2} \rangle_v = \sum_{iv} \varphi_{v 1}(E_{iv}) \varphi_{v 2}(E_{iv}) \quad \text{for all } \varphi_{v 1}, \varphi_{v 2} \in L^2(F_v).$$

Consider the tensor product  $\mathcal{L} = L^2(\Omega_x) \otimes L^2(\Omega_y) \otimes L^2(\Omega_z) \otimes L^2(F_r) \otimes L^2(F_v)$  of the five Hilbert spaces of states. Let us remark that this tensor product of Hilbert space  $\mathcal{L}$  is dense in the Hilbert space  $\mathcal{H} = L^2(\Omega) \otimes L^2(F_r) \otimes L^2(F_v)$  where the scalar product is defined by

$$\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle = \sum_{ir, iv} \int_{\Omega} \varphi_1(V, E_{ir}, E_{iv}) \varphi_2(V, E_{ir}, E_{iv}) dV \quad \text{for all } \varphi_1, \varphi_2 \in \mathcal{H}. \quad (8)$$

Instead of studying the problem of the kernel  $K$ , we study the linear integral associated operator  $A$  defined on  $\mathcal{H}$  by

$$A(\psi) = \sum_{ir', iv'} \int_{\Omega'} K(V, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}, V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) \psi(V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) dV'. \quad (9)$$

Assume that the operator  $A$  has a purely discrete spectrum, and assume that its eigenfunctions are all in the Hilbert space  $\mathcal{L}$ . The kernel  $K$  can be written in the form

$$K = \sum_{j_x, j_y, j_z, j_r, j_v=0}^{\infty} \lambda_{j_x, j_y, j_z, j_r, j_v} \psi_{j_x}(V_x) \psi_{j_y}(V_y) \psi_{j_z}(V_z) \psi_{j_r}(E_{ir}) \psi_{j_v}(E_{iv}) \\ \times \psi_{j_x}(V'_x) \psi_{j_y}(V'_y) \psi_{j_z}(V'_z) \psi_{j_r}(E_{ir'}) \psi_{j_v}(E_{iv'}), \quad (10)$$

where the functions  $\psi_{j_x}(V_x) \psi_{j_y}(V_y) \psi_{j_z}(V_z) \psi_{j_r}(E_{ir}) \psi_{j_v}(E_{iv})$  are the eigenfunctions of  $A$  with their corresponding eigenvalues  $\lambda_{j_x, j_y, j_z, j_r, j_v}$ . According to the non-negativity and the normalization conditions, the eigenvalues must satisfy  $\lambda_{j_x, j_y, j_z, j_r, j_v} \in [0, 1]$  for all  $j_x, j_y, j_z, j_r, j_v \in \mathbb{N}$ . Moreover, one can see that, in the tensor product space  $\mathcal{L}$ , the scalar product (8) equals the scalar product defined in this tensor product space  $\mathcal{L}$  by the product of the five elementary scalar products (8). So, we can suppose that the eigenvalues have the form  $\lambda_{j_x} \lambda_{j_y} \lambda_{j_z} \lambda_{j_r} \lambda_{j_v}$  and that the set of functions  $\psi_{j_\chi}(M_\chi)$ ,  $j_\chi \in \mathbb{N}$ , is a function basis of the  $\chi$  corresponding Hilbert space  $\chi = x, y, z, r, v$ . Therefore, the expression (10) can be written as a product of five infinite sums,

$$K = \prod_{\chi \in \{x, y, z, r, v\}} \sum_{j=0}^{\infty} \lambda_j \psi_j(M_\chi) \psi_j(M'_\chi), \quad M_\chi = V_x, V_y, V_z, E_{ir}, E_{iv}. \quad (11)$$

Define  $\psi_0 = \psi_{0_x} \psi_{0_y} \psi_{0_z} \psi_{0_r} \psi_{0_v}$  by



$$\psi_{0_x}(V_x) = \frac{\sqrt{2}}{C_w} |V_x|^{1/2} e^{-V_x^2/2C_w^2}, \quad \psi_{0_y}(V_y) = (C_w \sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-V_y^2/2C_w^2},$$

$$\psi_{0_z}(V_z) = (C_w \sqrt{\pi})^{-1/2} e^{-V_z^2/2C_w^2}, \quad \psi_{0_r}(E_{ir}) = \sqrt{\frac{g_{ir}}{Q_r}} e^{-1/2 \epsilon_{ir}}, \quad \psi_{0_v}(E_{iv}) = \frac{e^{-1/2 \epsilon_{iv}}}{\sqrt{Q_v}}.$$

Let us prove that  $\psi_0$  is an eigenfunction of  $A$ . Mathematically, the normalization condition can be also written

$$\sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} B(-V, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}, -V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) dV' = 1, \tag{12}$$

from this relation (12), the reciprocity relation (3) leads to

$$\sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} |V_x| f_0(V', E_{ir'}, E_{iv'}) B(V'_R, E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}, V, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}) dV' = |V_x| f_0(-V, E_{ir}, E_{iv}). \tag{13}$$

Using the relation (13), the calculation of  $A(\psi_0)$  gives  $A(\psi_0) = \psi_0$ . Consequently  $\psi_0 = \psi_{0_x} \psi_{0_y} \psi_{0_z} \psi_{0_r} \psi_{0_v}$  is an eigenfunction of the operator  $A$  associated to the eigenvalue 1.

Now, following the five state parameters, let us introduce five parameters related to the eigenvalues as follows:  $\lambda_{0_\chi} = 1$ , and for  $j \neq 0, \lambda_{j_\chi} = (1 - \alpha_\chi)$  for all  $\chi = x, y, z, r, v$ . The relation (11) becomes

$$K = \prod_{\chi \in \{x,y,z,r,v\}} \left[ \psi_{0_\chi}(M_\chi) \psi_{0_\chi}(M'_\chi) + (1 - \alpha_\chi) \sum_{j=1}^{\infty} \psi_{j_\chi}(M_\chi) \psi_{j_\chi}(M'_\chi) \right]$$

which may be written

$$K = \prod_{\chi \in \{x,y,z,r,v\}} \left[ \alpha_\chi \psi_{0_\chi}(M_\chi) \psi_{0_\chi}(M'_\chi) + (1 - \alpha_\chi) \sum_{j=1}^{\infty} \psi_{j_\chi}(M_\chi) \psi_{j_\chi}(M'_\chi) \right].$$

Finally, using the following property,

$$\sum_{j=0}^{\infty} \psi_{j_\chi}(M_\chi) \psi_{j_\chi}(M'_\chi) = \delta(M_\chi - M'_\chi),$$

where  $\delta$  is the dirac function, it is obtained

$$K = \{ \alpha_x \psi_{0_x}(V_x) \psi_{0_x}(V'_x) + (1 - \alpha_x) \delta(V_x - V'_x) \} \{ \alpha_y \psi_{0_y}(V_y) \psi_{0_y}(V'_y) + (1 - \alpha_y) \delta(V_y - V'_y) \}$$

$$\times \{ \alpha_z \psi_{0_z}(V_z) \psi_{0_z}(V'_z) + (1 - \alpha_z) \delta(V_z - V'_z) \} \{ \alpha_r \psi_{0_r}(V_r) \psi_{0_r}(V'_r) + (1 - \alpha_r) \delta(V_r - V'_r) \}$$

$$\times \{ \alpha_v \psi_{0_v}(V_v) \psi_{0_v}(V'_v) + (1 - \alpha_v) \delta(V_v - V'_v) \}. \tag{14}$$

Applying inversely the transformation (5), the operator  $B$  corresponding to the kernel  $K$  above [relationship (14)] is

$$\begin{aligned}
B(V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}, V, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}) = & \left\{ (1 - \alpha_x) \delta(V'_x + V_x) + \alpha_x \frac{2V_x}{C_w^2} e^{-V_x^2/C_w^2} \right\} \\
& \times \left\{ (1 - \alpha_y) \delta(V'_y - V_y) + \alpha_y \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} e^{-V_y^2/C_w^2} \right\} \\
& \times \left\{ (1 - \alpha_z) \delta(V'_z - V_z) + \alpha_z \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} e^{-V_z^2/C_w^2} \right\} \\
& \times \left\{ (1 - \alpha_r) \delta(E_{ir'} - E_{ir}) + \alpha_r \frac{g_{ir}}{Q_r} e^{-\epsilon_{ir}} \right\} \\
& \times \left\{ (1 - \alpha_v) \delta(E_{iv'} - E_{iv}) + \alpha_v \frac{1}{Q_v} e^{-\epsilon_{iv}} \right\}. \quad (15)
\end{aligned}$$

In the further calculations, we will note the scattering kernel (15) simply as

$$B = P_x P_y P_z P_r P_v,$$

where  $P_x, P_y, P_z, P_r, P_v$  correspond, respectively, to the five factors of the expression (15). It would be seen that these five factors satisfy

$$\int_0^{+\infty} P_x dV_x = \int_{-\infty}^{+\infty} P_y dV_y = \int_{-\infty}^{+\infty} P_z dV_z = \sum_{ir} P_r = \sum_{iv} P_v = 1. \quad (16)$$

On the other hand when developing the expression (15) one obtains the kernel  $B$  as combination of 32 elementary scattering kernels where the coefficients are functions of the  $\alpha_\chi$ .

## B. On the coefficient $\alpha_\chi$

In this section we prove that the five coefficients  $\alpha_\chi$  involved in the scattering kernel equal, respectively, the accommodation coefficients of the various fluxes of the five microscopic state parameters ( $M_\chi = V_x, V_y, V_z, E_{ir}, E_{iv}$ ).

The accommodation coefficient  $\beta_\chi$  of a physical property  $M_\chi$  at the wall is defined through the relation<sup>3,4,8</sup>

$$\beta_\chi = \frac{\Phi_\chi^- - \Phi_\chi^+}{\Phi_\chi^- - \Phi_\chi^e}, \quad (17)$$

where  $\Phi_\chi^-$  is the incoming flux at the wall of the property  $M_\chi$ ,  $\Phi_\chi^+$  is the corresponding reflected flux, and  $\Phi_\chi^e$  is the reflected flux in the hypothetical situation of perfect accommodation to the wall. These various fluxes are written

$$\Phi_\chi^- = \sum_{ir', iv'} \int_{\Omega'} m |V'_x| M'_\chi f^-(V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) dV', \quad (18)$$

$$\Phi_\chi^+ = \sum_{ir, iv} \int_{\Omega} m |V_x| M_\chi f^+(V, E_{ir}, E_{iv}, g_{ir}) dV, \quad (19)$$

where  $f^-$  and  $f^+$  are, respectively, the incident and the reflected distribution functions linked by the relation

$$|V_x|f_i^+(V, E_{ir}, g_{ir}, E_{iv}) = \sum_{ir', iv'} \int_{\Omega'} |V'_x|f^-(V', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'})B(V', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}, V, E_{ir}, g_{ir}, E_{iv})dV'. \quad (20)$$

Accounting for (20), the reflected flux  $\Phi_\chi^+$  [expression (19)] may be rewritten as

$$\Phi_\chi^+ = \sum_{ir', iv'} \int_{\Omega'} m|V'_x|f^-(V', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}) \left[ \sum_{ir, iv} \int_{\Omega} M_\chi P_x P_y P_z P_r P_v dV \right] dV', \quad (21)$$

and the reflected flux in the case of perfect accommodation is written as

$$\Phi_\chi^e = \sum_{ir', iv'} \int_{\Omega'} m|V'_x|f^-(V', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}) \left[ \sum_{ir, iv} \int_{\Omega} M_\chi B_e dV \right] dV', \quad (22)$$

where  $B_e$ , the perfect accommodation scattering kernel, is defined by

$$B_e = \frac{2g_{ir}}{Q_r Q_v C_w^4 \pi} V_x e^{-\|V\|^2} C_w^2 e^{-\epsilon_{ir}} e^{-\epsilon_{iv}}. \quad (23)$$

### 1. Calculation of $\beta_y$ and $\beta_z$

The tangential accommodation coefficient,  $\beta_y$ , is obtained by substituting  $M_\chi = V_y$  in the definition relation (17). In this case it is easily seen that  $\Phi_y^e = 0$ . Then accounting for the property (16) the expression (21) leads to

$$\Phi_y^+ = (1 - \alpha_y) \sum_{ir', iv'} \int_{\Omega'} mV'_y |V'_x| f^-(V', E_{ir'}, g_{ir'}, E_{iv'}) dV'.$$

It results immediately from expression (17)

$$\beta_y = 1 - \frac{\Phi_y^+}{\Phi_y} = \alpha_y.$$

Similarly it is found,

$$\beta_z = 1 - \frac{\Phi_z^+}{\Phi_z} = \alpha_z.$$

### 2. Calculation of $\beta_x$

The normal accommodation coefficient is obtained by substituting  $M_\chi = |V_x|$  in the definition (17). In this case, accounting for the property (16) and the expressio of the partial operator  $P_x$ , it is obtained

$$\sum_{ir, iv} \int_{\Omega} |V_x| P_x P_y P_z P_r P_v dV = -(1 - \alpha_x) V'_x + \alpha_x \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2}$$

then the expression (21) yields.

$$\Phi_x^+ - \Phi_x^- = \alpha_x \sum_{ir', iv'} \int_{\Omega'} m|V'_x|f^-(V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) \left( V'_x + \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2} \right) dV'.$$

The calculation of  $\Phi^e$  leads easily to

$$\Phi_x^e - \Phi_x^- = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m|V'_x|f^-(V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) \left( V'_x + \frac{C_w \sqrt{\pi}}{2} \right) dV'.$$

Consequently we obtained from the relation (17),

$$\beta_x = \alpha_x.$$

### 3. Calculation of $\beta_r$ and $\beta_v$

Now substitute  $M_\chi = g_{ir} E_{ir}$  in the relation (17). Accounting for the property (16) it is obtained

$$\sum_{ir,iv} \int_{\Omega} g_{ir} E_{ir} P_x P_y P_z P_r P_v dV = \sum_{ir} g_{ir} E_{ir} P_r = (1 - \alpha_r) g_{ir'} E_{ir'} + \alpha_r \frac{Q_r^*}{Q_r},$$

where we have noted

$$Q_r^* = \sum_{ir} g_{ir}^2 E_{ir} e^{-\varepsilon_{ir}}.$$

Then the expression of  $\Phi^+$  leads to

$$\Phi_{E_{ir}}^- - \Phi_{E_{ir}}^e = \alpha_r \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m|V'_x|f^-(V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) \left( g_{ir'} E_{ir'} - \frac{Q_r^*}{Q_r} \right) dV'.$$

Using the expression (23) of  $B_e$ , we obtain

$$\sum_{ir,iv} \int_{\Omega} g_{ir} E_{ir} B_e dV = \frac{Q_r^*}{Q_r}$$

and then

$$\Phi_{E_{ir}}^- - \Phi_{E_{ir}}^e = \sum_{ir',iv'} \int_{\Omega'} m|V'_x|f^-(V', E_{ir'}, E_{iv'}, g_{ir'}) \left( g_{ir'} E_{ir'} - \frac{Q_r^*}{Q_r} \right) dV'$$

consequently,

$$\beta_r = \alpha_r.$$

In the same way, substituting  $M_\chi = E_{iv}$ , it is found

$$\beta_v = \alpha_v.$$

In conclusion, the five parameters  $\alpha_\chi$  involved in the scattering kernel (15) are the accommodation coefficients corresponding to the five state parameters, namely the three momentum components and the two internal energy degrees.

### III. COMMENT ON THE METHOD USED IN SCATTERING KERNEL DERIVATION

The  $\mathcal{H}$  Hilbert space corresponds generally to the Hilbert space used in the framework of the modelling of the Boltzmann equation in polyatomic gases. Following the quantum mechanic concept, the wall and then the boundary conditions can be represented by an operator defined on this  $\mathcal{H}$  Hilbert space.<sup>4,6,8,9</sup> Therefore the problem of boundary condition for the Boltzmann equation can be basically formulated through the integral operator (9), so this formulation is convenient for solving the linearized Boltzmann equation. The reciprocity relation assumption globally means that the local equilibrium distribution function must be invariant by the kernel  $B$ .<sup>8,9</sup> This last condition, which contains thermodynamic properties is the most important condition. In addition, it is the only one condition containing physical meaning. This condition leads to the first eigen-

function representation  $\psi_0$ . The other eigenfunctions remain unknown. At this step of the scattering kernel construction, one should suggest to choose the set of the other eigenfunctions<sup>10</sup> or a finite number of them. But, such a way would be a purely mathematical construction without real physical justifications.<sup>4,7</sup>

Then, another way consists to analyze physically the accommodation process. Let us consider the couple gas/surface characterized by its macroscopic properties. It seems convenient to assume that for each microscopic property  $p$  of the molecules, the solid surface behaves in a way perfectly defined in the accommodation process. In other words, in a gas/surface configuration, physically and geometrically given, for each microscopic property there is a linear relation between the amount of the  $p$  flux accommodated by the wall and the amount of the  $p$  incoming flux. So the accommodation at the wall of any physical microscopic property provides a physical information through a corresponding accommodation coefficient. Thus, five elementary accommodation coefficients associated to the five basic parameters defining the molecule states (the three momentum components, rotational energy, vibrational energy) are naturally introduced completely describing the molecules behavior in the reflection process. In this way, the present construction of the polyatomic scattering kernel is based on five accommodation coefficients, and corresponds to an integral operator partially degenerated involving 32 different eigenvalues in its expansion: from our point of view, this construction appears physically founded and completely describing the reflection process.

#### IV. CONCLUDING REMARKS

We have established a scattering kernel for structured molecules involving one rotational and one vibrational energy mode. A convenient integral operator formulation is used assuming a purely discrete spectrum and assuming eigenvalues depending on five basic parameters in respect to the five state parameters of the molecules (and then assuming a partial degeneracy of the integral operator). These five basic parameters are shown to be the accommodation coefficients of, respectively, the three momentum accommodation coefficients and the accommodation coefficients of the two internal energy modes.

Under its factorized form (15), the proposed scattering kernel is easy to use in analytical calculations or to be implemented in numerical modelling. In order to show its physical meaning, the expression (15) may be developed. Under its developed form, the scattering kernel appears as a linear combination of 32 elementary scattering kernels (listed in the Appendix). All these elementary kernels correspond to various situations of accommodation at the wall which have been described in Ref. 5. The linear combination coefficients, which represent the weight of the various types of accommodation in the reflection process, are combinations of the factors  $\alpha_\chi$  and  $(1 - \alpha_\chi)$  (see the Appendix). In each elementary kernel each molecule state accommodates independently from the others. So the new kernel allows us to take into account the interplay between the molecule freedom degrees when interacting at the wall.<sup>11</sup> Up to now, the data available concerning the whole set of accommodation coefficients involved in the proposed scattering kernel are rare; that makes a complete validation of the model difficult.

Finally, let us add that, in the form presented here, the scattering kernel accounts for a single rotational and a single vibrational mode. This description is sufficient in any condition for diatoms. In the case of more complex polyatomic structures, involving various vibrational (or rotational) modes, the present form of scattering kernel remains directly usable, as long as the various vibrational (or rotational) modes remain in the same thermodynamics state (i.e., in local equilibrium the ones with the others). In a contrary situation (for example, in strong vibrational nonequilibrium conditions) it may be pertinent—depending on the considered time scale—to distinguish various vibrational (or rotational) accommodation coefficients to describe the reflection process. In such a case, the scattering kernel should be written in the same way as previously, but it should involve more than five state parameters, and thus more than five accommodation coefficients.

**APPENDIX: DIFFERENT WRITING OF THE SCATTERING KERNEL  $B$  OF RELATION (15)**

Let

$$\begin{aligned}\tilde{P}_0 &= \delta(E_{ir'} - E_{ir})\delta(E_{iv'} - E_{iv}), & \tilde{P}_{rv} &= \frac{e^{-\varepsilon_{ir}}}{Q_r} g_{ir} \frac{e^{-\varepsilon_{iv}}}{Q_v}, \\ \tilde{P}_v &= \delta(E_{ir'} - E_{ir}) \frac{e^{-\varepsilon_{iv}}}{Q_v}, & \tilde{P}_r &= \frac{e^{-\varepsilon_{ir}}}{Q_r} g_{ir} \delta(E_{iv'} - E_{iv}).\end{aligned}\quad (\text{A1})$$

Develop partially the expression (15). The scattering kernel can be written in the form presented in Ref. 5, as follows:

$$B = \left( \sum_{\kappa} \mu_{\kappa} B_{\kappa}(V', V) \right) (1 - \alpha_r)(1 - \alpha_v) \tilde{P}_0 + \alpha_v(1 - \alpha_r) \tilde{P}_v + \alpha_r(1 - \alpha_v) \tilde{P}_r + \alpha_v \alpha_r \tilde{P}_{rv}, \quad (\text{A2})$$

where  $B_{\kappa}$  the elementary scattering kernels, and  $\mu_{\kappa}$  their corresponding coefficients in the case of unstructured molecule given in Ref. 5, are recalled below,

$$B_0(V', V) = \delta(V_x + V'_x) \delta(V_y - V'_y) \delta(V_z - V'_z),$$

$$B_{yz}(V', V) = \frac{1}{\pi C_w^2} \delta(V_x + V'_x) e^{-V_y^2/C_w^2} e^{-V_z^2/C_w^2},$$

$$B_{xz}(V', V) = \frac{2}{C_w^3 \sqrt{\pi}} V_x \delta(V_y - V'_y) e^{-V_x^2/C_w^2} e^{-V_z^2/C_w^2},$$

$$B_{xy}(V', V) = \frac{2}{C_w^3 \sqrt{\pi}} V_x \delta(V_z - V'_z) e^{-V_x^2/C_w^2} e^{-V_y^2/C_w^2},$$

$$B_{xyz}(V', V) = \frac{2}{\pi C_w^4} V_x e^{-V_x^2/C_w^2} e^{-V_y^2/C_w^2} e^{-V_z^2/C_w^2},$$

$$B_z(V', V) = \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(V_x + V'_x) \delta(V_y - V'_y) e^{-V_z^2/C_w^2},$$

$$B_y(V', V) = \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} \delta(V_x + V'_x) \delta(V_z - V'_z) e^{-V_y^2/C_w^2},$$

$$B_x(V', V) = \frac{2}{C_w^2} V_x \delta(V_y - V'_y) \delta(V_z - V'_z) e^{-V_x^2/C_w^2},$$

and

$$\begin{aligned}\mu_{xz} &= \alpha_x \alpha_z (1 - \alpha_y), & \mu_{xy} &= \alpha_x \alpha_y (1 - \alpha_z), & \mu_{yz} &= \alpha_y \alpha_z (1 - \alpha_x), & \mu_x &= \alpha_x (1 - \alpha_y)(1 - \alpha_z), & \mu_{xyz} \\ &= \alpha_x \alpha_y \alpha_z, & \mu_0 &= (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y)(1 - \alpha_z), & \mu_y &= \alpha_y (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_z), & \mu_z &= \alpha_z (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y).\end{aligned}$$

A complete development of expression (15) yields the scattering kernel written as a sum of 32 elementary polyatomic scattering kernels  $B_{\kappa} \tilde{P}_{in}$  as follows:

$$B = \sum_{\kappa, in} \mu_{\kappa} \mu_{in} B_{\kappa} \tilde{P}_{in},$$

where  $\tilde{P}_{in}$  refers to the four partial operators  $\tilde{P}_0, \tilde{P}_v, \tilde{P}_r, \tilde{P}_{rv}$  defined in the relationship (A1) and  $\mu_{in}$  to their respective coefficients in the formula (A2). In this developed form it is clear that this scattering kernel describes various types of accommodation processes at the wall. Each of the partial scattering kernels  $B_{\kappa} \tilde{P}_{in}$  corresponds to a particular type of accommodation. There are exactly 32 types.

<sup>1</sup>R. G. Lord, Phys. Fluids **7**, 1159 (1995).

<sup>2</sup>R. G. Lord, Phys. Fluids A **3**, 706 (1991).

<sup>3</sup>I. Kuscer, *International Symposium on Rarefied Gas Dynamics* (Göttingen, 1974), Vol. E1, pp. 1–21.

<sup>4</sup>C. Cercignani, R. Illner, and M. Pulvirenti, *The Mathematical Theory of Dilute Gases* (Springer-Verlag, New York, 1994).

<sup>5</sup>S. K. Dadzie and J. G. Meolans, J. Math. Phys. **45**, 1804 (2004).

<sup>6</sup>C. Cercignani, J. Stat. Phys. **1**, 297 (1969).

<sup>7</sup>C. Cercignani, *Mathematical Methods in Kinetic Theory* (Plenum, New York, 1990), Chap. 4, p. 98.

<sup>8</sup>S. F. Shen, Entropie **18**, 138 (1967).

<sup>9</sup>S. Nocilla, Meccanica **2**, 34 (1967).

<sup>10</sup>C. Cercignani and M. Lampis, Transp. Theory Stat. Phys. **1**, 101 (1971).

<sup>11</sup>D. Bruno, M. Cacciatore, S. Longo, and M. Rutigliano, Chem. Phys. Lett. **320**, 245 (2000).



Available online at [www.sciencedirect.com](http://www.sciencedirect.com)

SCIENCE @ DIRECT®

Physica A 358 (2005) 328–346

PHYSICA A

[www.elsevier.com/locate/physa](http://www.elsevier.com/locate/physa)

# Temperature jump and slip velocity calculations from an anisotropic scattering kernel

S. Kokou Dadzie\*, J. Gilbert Méolans

*Université de Provence, UMR CNRS 6595, Département de Mécanique Energétique - IUSTI,  
5, rue Enrico Fermi 13453 Marseille, cedex 13, France*

Received 24 January 2005  
Available online 31 May 2005

---

## Abstract

This article deals with the problem of temperature jump and slip velocity at the wall in gas/surface interaction. A consistent modelling of an impermeable surface involving an anisotropic scattering kernel developed in previous works is used to establish boundary conditions in unstructured molecule gas flows. Thus, a temperature jump relation is derived in which the gas viscous effects at the wall and the mean velocity gradients appear. Likewise, a slip velocity relation is obtained in which both the slip coefficient and the thermal creep coefficient depend on the wall-to-gas temperature ratio. Moreover, both the temperature jump and the slip velocity relations involve not only one accommodation coefficient as usual, but also the gas/surface information through the various (notably normal and tangential) accommodation coefficients of the momentum components.

© 2005 Elsevier B.V. All rights reserved.

*Keywords:* Gas-wall interaction; Boltzmann equation; Temperature jump; Slip velocity; Slip flows

---

## 1. Introduction

The validity domain of the continuum equations can be extended up to higher Knudsen numbers in the range corresponding to the slip regime, like in moderately

---

\*Corresponding author.

*E-mail addresses:* [kokou.Dadzie@polytech.univ-mrs.fr](mailto:kokou.Dadzie@polytech.univ-mrs.fr) (S.K. Dadzie),  
[gilbert.meolans@polytech.univ-mrs.fr](mailto:gilbert.meolans@polytech.univ-mrs.fr) (J.G. Méolans).



rarefied gas flows and in microflows, if correct slip velocity and temperature jump relations are used as boundary conditions. In this regard, it is necessary, for modelling physical phenomena at the mean free path scale, to obtain accurate slip and jump conditions on the wall. So doing, a good form of boundary condition for the Boltzmann equation is also obtained.

Experiments in microflows (MEMS, microconduct) showed that, in this flow regime, pressure gradients, temperature gradients and velocity gradients become strongly sensitive and interlinked even at low speeds [1]. A well-known phenomenon appearing under these conditions is the thermal creep [2–5]. In view of these effects, the macroscopic gradients interplay and the relevant phenomena, such as temperature or pressure variations due to the viscous dissipation or to the transformation of mechanical energy into internal energy, should receive consideration other than in ordinary flows.

In the usual formulation of the temperature jump problem, the heat conduction is considered in a rarefied gas bounded by a plane wall exposed to a uniform heat flow normal to the wall [6–9]. In this formulation, the temperature jump is governed by the temperature gradient only and the gas macroscopic motion is not taken into account. This treatment would be consistent with the negligible effects of the irreversible conversion of mechanical energy into internal energy, i.e., heat energy, via the viscous dissipation in the flow. However, at the boundary, this argument is contradicted by the macroscopic gradient sensitivity and the surface effects [10–12]. Thus the gas rubbing against the surface can cause temperature variations at the wall. On the other hand, temperature jump relations are generally derived using either a complete diffuse scattering kernel [7,13,14] or at best using only one accommodation coefficient in the surface modelling [8,9,15–17]. A very similar way is generally used to obtain the slip velocity [2,18,19]. However it is well known that the completely diffuse scattering kernel is not a good surface description [20]. Furthermore the single accommodation coefficient process is a rough qualitative description of the particle reflection at the wall related to the Maxwell boundary condition formulation [2]: Maxwell boundary condition exhibits only one accommodation coefficient for the accommodation of any kinetic properties whereas different accommodation coefficients can be calculated for each kinetic property (i.e., the three components of the momentum and energy) [21,22]. Slip equations involving various accommodation coefficients have rarely been presented [23].

In this article, we consider more generally the problem of boundary conditions on the temperature and on the macroscopic velocity from a microscopic level description and using the complete Chapman–Enskog approximation for the distribution function of the incoming particles only. So doing, contrary to the standard formulation [6–9], the temperature jump problem is connected with the gas macroscopic motion at the wall and so the slip velocity problem is completely coupled with the temperature jump problem. The reflection law governing the reflection of the distribution function at the boundary is described by an anisotropic scattering kernel [24], where the gas/surface interaction information lies on the various accommodation coefficients of the momentum components. The result

provides more general relations for the thermal boundary condition and for the slip velocity.

In Section 2, the scattering kernel is briefly presented. In Section 3, the problem of thermal boundary condition is investigated. The temperature jump so established appears as a more complete temperature jump relation depending on viscous effects, gas compressibility, and surface anisotropy. Section 4 deals with the boundary condition on the gas mean velocity. Although the slip velocity is structured like the previous slip velocity formula including the thermal creep, it depends on the temperature jump and also involves the tangential gradients of the normal mean velocity at the wall. The theoretical values so predicted for the slip coefficient are compared to measures.

## 2. Model of anisotropic scattering kernel

$\xi(\xi_x, \xi_y, \xi_z)$  denotes the velocity of reflected particles at the wall ( $\xi \in \{\Omega = \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}\}$ ),  $\xi'(\xi'_x, \xi'_y, \xi'_z)$  denotes the velocity of impinging particles ( $\xi' \in \{\Omega' = \mathbb{R}_- \times \mathbb{R} \times \mathbb{R}\}$ ) and  $(x, y, z)$  are the three spatial coordinates with  $x$  the normal axis to the wall oriented from the wall toward the gas.  $U(U_x, U_y, U_z)$  is the gas macroscopic velocity.  $V = \xi - U$  and  $V' = \xi' - U$  are the peculiar velocities, respectively, for reflected and impinging particles. Since the normal component of the macroscopic velocity will be equal to zero at the wall, we will also have at the wall ( $x = 0$ ),  $V \in \Omega$  and  $V' \in \Omega'$ ;  $n$  and  $T$  will, respectively, denote the gas numerical density and the gas temperature, and are obviously functions of  $(x, y, z)$ . The subscript “0” will denote the macroscopic parameters of the gas at the wall, but this subscript is omitted for the numerical density and for the gradients which are taken at the wall in any further result in the article.

The scattering kernel developed in Ref. [24] for the surface modelling may be written in a factorized form:

$$B(\xi', \xi) = \left( (1 - \alpha_x) \delta(\xi'_x + \xi_x) + \alpha_x \frac{2\xi_x}{C_w^2} e^{-\xi_x^2/C_w^2} \right) \left( (1 - \alpha_y) \delta(\xi'_y - \xi_y) + \alpha_y \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} e^{-\xi_y^2/C_w^2} \right) \left( (1 - \alpha_z) \delta(\xi'_z - \xi_z) + \alpha_z \frac{1}{C_w \sqrt{\pi}} e^{-\xi_z^2/C_w^2} \right), \quad (1)$$

where  $C_w^2 = 2kT_w/m$ , with  $T_w$  the wall temperature,  $k$  the Boltzmann constant, and  $m$  the molecular mass of the gaseous particles. Further on, we will note  $C_0^2 = 2kT_0/m$ , with  $T_0$  the temperature of the gas at  $x = 0$ . Unlike in some previous models using unknown coefficients, the three coefficients involved in the scattering kernel (1),  $\alpha_x$ ,  $\alpha_y$ , and  $\alpha_z$ , are shown to equal the three accommodation coefficients of the fluxes of the momentum components [24]. Thereby, these parameters cannot take an arbitrary value. Moreover, this model includes various kinds of accommodation processes, and allows distinguishing the accommodations of the different kinetic properties.

### 3. On the gas temperature at $x = 0$

A correct microscopic level modelling at the boundary cannot be formulated using a single distribution function for the particles at the wall but using incident  $f^-$  and reflected  $f^+$  distribution functions. Accordingly, the boundary condition for the temperature can be derived from different accounts of the heat flux at the surface  $x = 0$ . Practically, the heat flux obtained from the local expression using the two particle distribution functions ( $f^-$  and  $f^+$ ) is equaled to the usual heat flux definition given by the whole particle conception.

Let us note  $Q_0$  the gas heat flux per surface unit through the wall expressed at  $x = 0$ ,  $\vec{Q}$  the heat flux vector at the same point, and  $\vec{n}$  the normal vector oriented from the gas towards the wall, thus

$$\vec{Q} \cdot \vec{n} = Q_0. \quad (2)$$

Using the Fourier law, with the gas heat conductivity  $\lambda_c$

$$\vec{Q} \cdot \vec{n} = -(-\lambda_c \nabla T) = \lambda_c \frac{\partial T}{\partial x}, \quad (3)$$

on the other hand, from the kinetic theory formalism,  $Q_0$  is expressed by

$$Q_0 = \int_{\Omega'} \left[ \frac{1}{2} m |V'_x| V'^2 f^- \right] d_{\xi'} - \int_{\Omega} \left[ \frac{1}{2} m |V_x| V^2 f^+ \right] d_{\xi}. \quad (4)$$

The reflected and the incoming distribution functions are related at the wall as follows:

$$|V_x| f^+ = \int_{\Omega'} |V'_x| f^- B(\xi', \xi) d_{\xi'}. \quad (5)$$

From relation (5) the local heat flux expression at the wall is written

$$Q_0 = \int_{\Omega'} \left[ \frac{1}{2} m |V'_x| V'^2 f^- \right] d_{\xi'} - \int_{\Omega'} \left[ \frac{1}{2} m |V'_x| f^- \int_{\Omega} V^2 B(\xi', \xi) d_{\xi} \right] d_{\xi'}. \quad (6)$$

In this last integral, the  $\int_{\Omega} V^2 B(\xi', \xi) d_{\xi}$  factor can be calculated separately using the scattering kernel (1) (see detailed calculation in the appendix). Then the local heat flux expression (6) becomes

$$Q_0 = \frac{1}{2} m \int_{\Omega'} [(\alpha_x V_x'^2 + \alpha_y V_y'^2 + \alpha_z V_z'^2) - \sigma_0 C_w^2 - \alpha_y U_y^2 - \alpha_z U_z^2] |V'_x| f^- d_{V'}, \quad (7)$$

where

$$\sigma_0 = (\alpha_x + \frac{1}{2}(\alpha_y + \alpha_z)). \quad (8)$$

Now we have to choose an incoming distribution function  $f^-$ . Previous approaches generally considered a simplified version of Chapman–Enskog distribution function where all velocity gradients were cancelled; furthermore in the various methods employed, the gas motion is rarely taken into account [6–8,13]. Considering the fact

that the incoming particle distribution function should be close to the particle distribution function outside the Knudsen layer, precisely close to that used to derive the complete continuum equations, we consider here the full version of the Chapman–Enskog distribution including all the terms [9]. It is to be noted that temperature jump and slip velocity problems arise even at the Navier–Stokes level and are not reduced to a purely Knudsen layer description problem even if a consistent Knudsen layer description can give a correction on the results provided by the Navier–Stokes level calculations [14]. Then,  $f^-$  is written as

$$f^- = f_M[1 + \varphi], \quad (9)$$

where  $f_M(V') = n/(C_0\sqrt{\pi})^3 e^{-(V'^2/C_0^2)}$  is the Maxwellian at temperature  $T_0$  of the gas and  $\varphi(V')$  is a deviation from the Maxwellian, written in its complete Enskog approximation form for a simple gas [9]

$$\begin{aligned} \varphi(V') = \frac{m}{kT_0} \left[ \frac{\lambda_c}{nkT_0} \nabla T \cdot V' \left( 1 - \frac{2}{5C_0^2} V'^2 \right) \right. \\ \left. + \frac{\mu}{nkT_0} \left( V'_i V'_j - \frac{1}{3} V'^2 \mathbb{I} \right) : \frac{\partial U_i}{\partial X_j} \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

$\mathbb{I}$  denotes the second-order identity tensor, “:” denotes the double contraction of the tensorial product,  $V'_i V'_j$  and  $\partial U_i / \partial X_j$  are the usual second-order tensors,  $\mu$  is the shear viscosity. Let us note that in expression (10), the Chapman–Enskog distribution is written at the wall, thus the sign of the velocity gradient is inverted, according to the theoretical kinetic theory definition of the gas mean velocity at the boundary (see the definition of the gas mean velocity at the wall in Section 4) [2].

In regard to relations (7) and (9) let us note

$$Q_0 = Q_{0M} + Q_{0\varphi}, \quad (11)$$

where  $Q_{0M}$  denotes the contribution of  $f_M(V')$  and  $Q_{0\varphi}$  denotes the contribution of  $\varphi(V')$  to  $Q_0$ . The calculations of  $Q_{0M}$  and  $Q_{0\varphi}$ , summarized in the appendix, yield:

$$Q_{0M} = \frac{mnC_0}{4\sqrt{\pi}} \sigma_0 (C_0^2 - C_w^2) - \frac{mnC_0}{4\sqrt{\pi}} (\alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2) \quad (12)$$

and

$$\begin{aligned} Q_{0\varphi} = \frac{\sigma_1 m \lambda_c}{20 k T_0} C_0^2 \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\mu m C_0}{12 k T_0 \sqrt{\pi}} (\sigma_0 C_w^2 + \alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2) \left[ 3 \frac{\partial U_x}{\partial x} - \nabla \cdot U \right] \\ + \frac{\mu m C_0^3}{4 k T_0 \sqrt{\pi}} \left[ 3 \alpha_x \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\alpha_y - \alpha_z}{2} \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\alpha_z - \alpha_y}{2} \frac{\partial U_z}{\partial z} \right] \end{aligned} \quad (13)$$

with

$$\sigma_1 = 3\alpha_x + \alpha_y + \alpha_z. \quad (14)$$

### 3.1. A complete thermal boundary condition

The complete expression of the heat flux  $Q_0$  is obtained by adding expressions (12) and (13). Then, applying condition (2) we deduce the expression of  $C_0^2 - C_w^2$ . Finally, from  $C_0^2 - C_w^2 = \frac{2k}{m}(T_0 - T_w)$ , we obtain:

$$\begin{aligned} (T_0 - T_w) - \frac{\mu}{nk} \left( \frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{1}{3} \nabla \cdot U \right) & \left[ \frac{T_w}{T_0} + \frac{1}{\sigma_0 C_0^2} (\alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2) \right] \\ & = \frac{\lambda_c \sqrt{\pi}}{nk C_0} \left( \frac{2 - (\sigma_1/5)}{\sigma_0} \right) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\mu}{nk} \left[ \frac{3\alpha_x}{\sigma_0} \frac{\partial U_x}{\partial x} + \frac{\alpha_y - \alpha_z}{2\sigma_0} \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\alpha_z - \alpha_y}{2\sigma_0} \frac{\partial U_z}{\partial z} \right] \\ & + \frac{T_0}{\sigma_0 C_0^2} (\alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2). \end{aligned} \quad (15)$$

In Eq. (15) each gradient is taken at the position  $x = 0$ , i.e., its value at the boundary obtained from the continuum equations.

The approach used above to derive the thermal boundary condition may be commented in the following way: first, as a consequence of the weak influence of the temperature and density variation in the Knudsen layer [6,25,26] the double formulation of the heat flux may be considered as meaning that the heat flux is conserved through this layer. This assumption is not surprising at all, since it is usually considered as a basic property of the Knudsen layer [6]. Secondly, it is admitted that the distribution function of the incoming particles is not significantly changed by the gas/gas collisions occurring in the Knudsen layer. Therefore, we use a Chapman–Enskog approximation for the incoming particle distribution function considered as frozen along the Knudsen layer. So we can write relation (15), confusing the value of the normal temperature gradient at the Knudsen layer inlet with its value at the wall. Although used by several authors [2,13,16] this latter assumption is not completely founded in some situations, specially when the flow is not sufficiently rarefied or when the temperature jump is of the same order as the temperature itself [13].

### 3.2. General comment on the thermal boundary condition (15)

Relation (15) is a three-dimensional thermal boundary condition based on the complete Chapman–Enskog approximation for the incoming distribution function. It appears that this relation is structured in the same way as the continuum energy equation. The second term on the left-hand side and the second term on the right-hand side including the velocity gradients may be associated to the shear work at the solid boundary due to the gas motion. These two terms involve notably the gas compressibility and the surface anisotropy effects. The first term on the right-hand side is due to the conduction heat flux associated to the normal temperature gradient. Accordingly, relation (15) shows a contribution of local viscous heating to the temperature jump through the velocity gradients. Therefore, the temperature jump is no longer supported by the temperature gradient only. In any case, these terms involving velocity gradients should receive attention in the slip flow regime and

specially in the flows interacting with an anisotropic surface. On both sides of formula (15), the last terms in which the square of the slip velocity component appears, may be associated to the macroscopic mechanical energy lost into heat energy due the wall interaction. However, the slip velocity ( $U_y$  and  $U_z$  at  $x = 0$ ) is generally negligible compared to the thermal velocity  $C_0$ . This is specially obvious in microflows because the Mach number is small and thus the maximal streamwise velocity is itself small compared to the thermal velocity. Furthermore, this is also admitted by various authors (Scott, Gupta, Shidlovsky, Patterson, et al.) in the spatial research field [27]. Therefore the terms including the slip velocities ( $U_y^2/C_0^2$  and  $U_z^2/C_0^2$ ) will be neglected in expression (15) and the temperature jump relation is written in the following form:

$$(T_0 - T_w) = \frac{\lambda_c \sqrt{\pi}}{nkC_0} \left( \frac{2 - (\sigma_1/5)}{\sigma_0} \right) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\mu}{nk} \left( \frac{3\alpha_x}{\sigma_0} - \frac{2T_w}{3T_0} \right) \frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{\mu T_w}{3nkT_0} \left( \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z} \right) - \frac{\mu}{nk} \left[ \frac{\alpha_y - \alpha_z}{2\sigma_0} \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\alpha_z - \alpha_y}{2\sigma_0} \frac{\partial U_z}{\partial z} \right]. \quad (16)$$

The coefficient  $(2 - (\sigma_1/5))/(\sigma_0/2)$  in front of the temperature gradient term substitutes the usual coefficient  $((2 - \sigma_T)/\sigma_T)$  which appeared in the previous temperature jump relations [8,15,16] where  $\sigma_T$  was the thermal accommodation coefficient. Let us point out that, when  $f^-$  used with the scattering kernel (1) is assumed to be a nondrifting Maxwellian distribution function, then  $\sigma_0/2$  equals the energy accommodation coefficient (see the appendix). It is to note that some authors [6,28] had previously put forward corrections on the first coefficient  $((2 - \sigma_T)/\sigma_T)$  by means of approximated resolutions of the Boltzmann equation in the Knudsen layer. So, Welander replaced coefficient  $((2 - \sigma_T)/\sigma_T)$  by  $((2 - K\sigma_T)/\sigma_T)$  where  $K$ , calculated numerically, is equal to 0.827. In our approach, the correction naturally lies on the interplay of the three momentum accommodation coefficients coming from the scattering kernel redefinition.

*Temperature jump on an isotropic surface:*  $\alpha_y = \alpha_z$ .

The accommodation coefficients characterize both the gas and the surface. But some properties are only relevant to the surface. Therefore, the macroscopic isotropy of the surface implies that the corresponding scattering kernel must be invariant under rotation about the  $x$  normal axis. Thus, on such a surface, the two tangential momentum accommodation coefficients must be equal:  $\alpha_y = \alpha_z$  [21]. Let us note that this surface property does not entail that the normal accommodation coefficient  $\alpha_x$  should be equal to  $\alpha_y$  or  $\alpha_z$ ; thus the reflection process is not necessary globally isotropic. In this case, the temperature jump (16) is simplified:

$$(T_0 - T_w) = \frac{\lambda_c \sqrt{\pi}}{nkC_0} \left( \frac{2 - ((3\alpha_x + 2\alpha_y)/5)}{\alpha_x + \alpha_y} \right) \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\mu}{nk} \left( \frac{3\alpha_x}{\alpha_x + \alpha_y} - \frac{2T_w}{3T_0} \right) \frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{\mu T_w}{3nkT_0} \left( \frac{\partial U_y}{\partial y} + \frac{\partial U_z}{\partial z} \right), \quad (17)$$

where, according to previous remarks, the terms in  $U_y^2/C_0^2$  have been cancelled.

In the temperature jump relation (17) the novel two terms at the end in the left-hand side represent the contribution of the gas friction on the wall (including compressibility effects) to the temperature jump at the wall. The weight of these terms depends on the flow configuration and on the temperature ratio  $T_w/T_0$ .

### 3.3. Dimensional analysis in particular flow configurations

#### 3.3.1. One-dimensional flow normal to the wall

If the flow is normal to the wall and the surface is supposed to be an isotropic plane surface at uniform temperature, then the tangential gradients vanish in relation (16) ( or in relation (17)).

We use the following dimensionless quantities,

$$T^* = \frac{T}{T_w}, \quad U_x^* = \frac{U_x}{U_e}, \quad x^* = \frac{x}{h},$$

where  $U_e$  and  $T_e$  are, respectively, a constant speed and a constant temperature characterizing the flow far from the wall. The characteristic length  $h$  is chosen equal to the characteristic length of the Knudsen layer close to the wall. Note

$$K_T = \frac{2 - (\sigma_1/5)}{\frac{\sigma_0}{2}}, \quad K_x = \frac{3\alpha_x}{\sigma_0}, \quad \alpha_y = \alpha_z.$$

The simplified temperature jump takes the form

$$\frac{T_0 - T_w}{T_w} = \frac{\lambda_c}{nkh} \sqrt{\frac{\pi m}{2kT_0}} \left\{ \frac{K_T}{2} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} - \frac{k\mu}{m\lambda_m} U_e \sqrt{\frac{2m}{\pi kT_0}} \left( K_x \frac{T_0}{T_w} - \frac{2}{3} \right) \frac{\partial U_x^*}{\partial x^*} \right\}.$$

Now using the following relation between the thermal conductivity and the shear viscosity,  $k\mu/m\lambda_c = \frac{4}{15}$  [9,29], which requires no particular choice of interaction model apart from the basic Chapman–Enskog assumptions. Then defining the mean free path by  $\lambda_m = (\mu/mn)\sqrt{\pi m/2kT_0}$  as proposed by Cercignani [14], the dimensionless temperature jump relation may be rewritten in the following form:

$$T_0^* - 1 = K_n \left\{ K_T \frac{15}{8} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} - \sqrt{\frac{6}{\pi}} \mathfrak{R} \left( K_x T_0^* - \frac{2}{3} \right) \frac{\partial U_x^*}{\partial x^*} \right\}, \tag{18}$$

where  $K_n = \lambda_m/h$ , the Knudsen number characterizing the Knudsen layer is close to 1. The factor  $\mathfrak{R}$ , defined by  $\mathfrak{R}^2 = (1/2(mU_e^2))/(3/2(kT_0))$  may be written using  $Ma_e$  the Mach number far from the wall,  $\mathfrak{R} = \sqrt{5/3}(Ma_e)\sqrt{T_e/T_0}$ .

Such a configuration, where the flow is normal to the surface, seems convenient for modelling the boundary conditions of unsteady flows on the nose thermal shield of spatial vehicles during atmospheric re-entries. In these conditions, the  $\mathfrak{R}$  factor is frequently of the magnitude order of 1, since it is usual to obtain  $Ma_e$  slightly smaller than 1, whereas  $\sqrt{T_e/T_0}$  does not exceed 4 or 5 [30]. On the other hand, to compare the gradient orders of magnitude, it is convenient to introduce the following

dimensionless quantities:

$$\theta = \frac{T - T_w}{T_i - T_w}, \quad \omega = \frac{U_x}{U_i},$$

where the  $i$  subscript characterizes the state of the gas at the Knudsen layer inlet. Then

$$\frac{\partial T^*}{\partial x^*} = \frac{T_i - T_w}{T_w} \frac{\partial \theta}{\partial x^*}, \quad \frac{\partial U_x^*}{\partial x^*} = \frac{U_i}{U_e} \frac{\partial \omega}{\partial x^*}, \quad (19)$$

Here  $\partial\theta/\partial x^*$  and  $\partial\omega/\partial x^*$  are clearly of zero order, whereas  $U_i/U_e$  reflects the scale ratio between the Knudsen layer and the characteristic length of the flow (i.e., the Knudsen number  $K_{ne}$  far from the wall). So it appears from (19) that the relative influence of the velocity term in relation (18) depends on the thermal jump magnitude: if it is of the same order as the wall temperature the velocity terms are negligible. On the contrary, for small temperature jumps the model predicts a local viscous heating effect on the temperature jump, and the sign of this contribution may be inverted according to the value of the gas-to-wall temperature ratio.

### 3.3.2. Flow in boundary layer configurations

Let us consider relation (16) in a two-dimensional flow (the  $x$ -axis is normal to the wall and the  $z$ -axis components vanish), and let us perform the dimensional analysis of the configurations corresponding to Enskog boundary layers or to flows in microchannels. We define the dimensionless quantities as follows:

$$T^* = \frac{T}{T_w}, \quad U_x^* = \frac{U_x}{V_n}, \quad U_y^* = \frac{U_y}{U_s}, \quad y^* = \frac{y}{L}, \quad x^* = \frac{x}{h}.$$

$L$  is the characteristic length of the wall,  $h$  the boundary layer thickness or the channel height.  $U_e$  and  $V_n$ , respectively, refer to the tangential and normal velocity in the flow far from the wall.  $U_s$  is a constant characteristic velocity slip of the gas at the wall.

Note  $K_y = (\alpha_y - \alpha_z)/2\sigma_0$ ,  $\varepsilon_n = V_n/U_e$ ,  $\varepsilon_h = h/L$ ,  $\eta^0 = U_s/U_e$ ; the bi-dimensional temperature jump can be written in the following dimensionless form:

$$T_0^* - 1 = K_n \left\{ K_T \frac{15}{8} \frac{\partial T^*}{\partial x^*} - \sqrt{\frac{6}{\pi}} \Re \left[ \left( K_x T_0^* - \frac{2}{3} \right) \varepsilon_n \frac{\partial U_x^*}{\partial x^*} - \left( K_y T_0^* + \frac{1}{3} \right) \eta^0 \varepsilon_h \frac{\partial U_y^*}{\partial y^*} \right] \right\}, \quad (20)$$

where  $\Re$  is defined exactly as it is in the normal flow configuration.

Considering this flow configuration it appears clearly that  $h/L \approx V_n/U_e \ll 1$ . Otherwise  $U_s/U_e < 1$  and then  $\eta^0 \varepsilon_h < \varepsilon_n \ll 1$ . Here any star-marked quantity is of the order of 1. Moreover in a classical boundary layer  $\Re$  is usually of the same order as in the case of the flow normal to the wall previously analyzed, i.e.,  $\Re \approx 1$ . But in the microflow fields, the Mach number is generally small compared to 1 ( $\approx 0.1 - 0.2$ ) and the ratio  $T_0/T_e$  is not very different from 1 [31]. Consequently  $\Re$  rarely exceeds



0.1 and the relative weight of the viscous terms on the temperature jump is generally very small; then their effects should be negligible in ordinary microflows.

In a simple configuration where the gas is assumed to be moving tangentially along the wall, only the velocity gradient along the  $y$ -axis subsists in relations (16) or (17). Then the viscous heating effects at the wall lie only on the fluid acceleration along the wall. In spite of its theoretical simplicity, this case is not realistic along an isotropic surface: because such a unidirectional flow field would exist only if the compressibility were neglected (as in Poiseuil flow), then  $\nabla \cdot U = 0$  and no velocity gradient would subsist in relation (17). But it is different when gradients coming from anisotropy are present as in relations (16) or (20): then even if the compressibility is negligible, unidirectional flows involving small viscous heating at the wall can appear.

#### 4. On the slip velocity

In the same way as the gas temperature at  $x = 0$  was derived from the account of heat flux, the mean velocity of the gas at  $x = 0$  can be derived from the account of the mass flux. This mass flux account at the wall leads us to calculate the mean velocity using averages based on the particle distribution function as formulated in the kinetic theory. But as pointed out by Maxwell [2], considering the momentum components, the macroscopic meaning of these averages calculated at the wall is reversed compared to the meaning taken in any point within the gas. So, it yields at  $x = 0$

$$-nU = \int_{\Omega'} \zeta' f^- d_{\zeta'} + \int_{\Omega} \xi f^+ d_{\xi}. \quad (21)$$

Project relation (21) on the  $x$ -axis. Using relation (5) between  $f^+$  and  $f^-$  and the normalization condition on the scattering kernel, it is found  $U_x = 0$ , due to the surface impermeability.

##### 4.1. Calculation of the slip velocity

Project relation (21) on the  $y$ -axis. Using relation (5) between  $f^+$  and  $f^-$ , it is obtained at  $x = 0$ ,

$$nU_y = \int_{\Omega'} \zeta'_x \left[ \int_{\Omega} \frac{\xi_y}{\xi_x} B(\zeta', \xi) d_{\xi} \right] f^- d_{\zeta'} - \int_{\Omega'} \zeta'_y f^- d_{\zeta'}.$$

The integral  $\int_{\Omega} (\xi_y/\xi_x) B(\zeta', \xi) d_{\xi}$  may be calculated separately with  $B(\zeta', \xi)$  given in relation (1). This calculation gives

$$\int_{\Omega} \frac{\xi_y}{\xi_x} B(\zeta', \xi) d_{\xi} = \alpha_x (1 - \alpha_y) \frac{\sqrt{\pi}}{C_w} \zeta'_y - (1 - \alpha_x) (1 - \alpha_y) \frac{\zeta'_y}{\zeta'_x}.$$

Therefore,

$$nU_y = \alpha_x(1 - \alpha_y) \frac{\sqrt{\pi}}{C_w} \int_{\Omega'} \xi'_x \xi'_y f^- d_{\xi'} - [1 + (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y)] \int_{\Omega'} \xi'_y f^- d_{\xi'}. \quad (22)$$

Now, choosing the same incoming distribution function as for the thermal jump calculation (relation (9)) and using the change  $\xi' = V' + U$ , relation (22) splits into

$$nU_y = \alpha_x(1 - \alpha_y) \frac{\sqrt{\pi}}{C_w} [U_y J_{0x} + U_y J_2 + J_4] - (1 + (1 - \alpha_x)(1 - \alpha_y)) [U_y J_0 + U_y J_1 + J_3], \quad (23)$$

where are denoted:

$$\begin{aligned} J_0 &= \int_{\Omega'} f_M d_{V'}, & J_{0x} &= \int_{\Omega'} V'_x f_M d_{V'}, \\ J_1 &= \int_{\Omega'} \varphi f_M d_{V'}, & J_2 &= \int_{\Omega'} V'_x \varphi f_M d_{V'}, \\ J_3 &= \int_{\Omega'} V'_y \varphi f_M d_{V'}, & J_4 &= \int_{\Omega'} V'_x V'_y \varphi f_M d_{V'}. \end{aligned}$$

$J_0$  and  $J_{0x}$  give easily  $J_0 = n/2$  and  $J_{0x} = -nC_0/2\sqrt{\pi}$ . The calculations of  $J_1, J_2, J_3$ , and  $J_4$ , involve the complex expression of  $\varphi$  given in relation (10). However these calculations are feasible and it is found

$$\begin{aligned} J_1 &= -\frac{3}{4} \frac{\mu}{mT_0 C_0 \sqrt{\pi}} \frac{\partial T}{\partial x}, & J_2 &= -\frac{\mu}{mC_0 \sqrt{\pi}} \left( \frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{1}{3} \nabla \cdot U \right), \\ J_3 &= -\frac{\mu}{mC_0 \sqrt{\pi}} \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right), & J_4 &= \frac{3}{8} \frac{\mu C_0}{mT_0 \sqrt{\pi}} \frac{\partial T}{\partial y} + \frac{\mu}{2m} \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (24)$$

Relation (23) can be arranged in the form

$$\begin{aligned} U_y \left( 4 - \gamma + \beta \frac{C_0}{C_w} \right) - \beta \frac{U_y 2C_0 \sqrt{\pi}}{C_0 n C_w} J_2 \\ + (2 - \gamma) \frac{U_y 2C_0}{C_0 n} J_1 = -(2 - \gamma) \frac{2}{n} J_3 + \beta \frac{2\sqrt{\pi}}{n C_w} J_4 \end{aligned} \quad (25)$$

with

$$\beta = \alpha_x(1 - \alpha_y), \quad \gamma = \alpha_y + \alpha_x(1 - \alpha_y).$$

Finally, from (25) and (24), the complete boundary condition on the  $y$  component of the tangential mean velocity is written in the following form:

$$\begin{aligned} U_y \left( 4 - \gamma + \beta \sqrt{\frac{T_0}{T_w}} \right) + \beta \frac{U_y 2\mu}{C_0^2 m n} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}} \left( \frac{\partial U_x}{\partial x} - \frac{1}{3} \nabla \cdot U \right) - (2 - \gamma) \frac{U_y}{C_0} \frac{3\mu}{2mnT_0 \sqrt{\pi}} \frac{\partial T}{\partial x} \\ = \frac{2\mu}{mnC_0 \sqrt{\pi}} \left( 2 - \gamma + \beta \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}} \right) \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right) + \beta \frac{3\mu}{4mnT_0} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}} \frac{\partial T}{\partial y}. \end{aligned} \quad (26)$$

Like the thermal boundary condition, the effects of using an Enskog distribution function for  $f^-$  will be commented in the conclusion. However, let us point out that through relation (21) we used the basic definition of the mean velocity in kinetic theory, instead of the usual rough momentum balancing generally used in slip velocity derivation [2,8,9]. Thus, the new approach appears as a direct calculation of the slip velocity, consistent with the kinetic theory formulation from the momentum components and accounting for the singularity of this formulation at the wall.

#### 4.2. Simplified expression of the slip velocity

Relation (26) is a complete boundary condition on the tangential velocity for the continuum equations. However, in this relation, the term involving the velocity gradients on the left-hand side and the term involving the velocity gradients on the right-hand side are in a magnitude order of the ratio  $U_y/C_0$ . It is the same for the terms involving the temperature gradients. As mentioned before in the discussion about the thermal boundary condition, the slip velocity of the gas at the wall is negligible compared to the thermal velocity (at  $x = 0$ ,  $U_y^2 \ll C_0^2$ ), thus the last two terms on the left-hand side of relation (26) can be neglected: the dimensional analysis (subsection 4.4) would confirm this choice with some restrictions for the normal temperature gradient term if a strong heat flux exists across the wall. Then the slip velocity component on the  $y$ -axis is written as

$$\begin{aligned} \left(4 - \gamma + \beta \sqrt{\frac{T_0}{T_w}}\right) U_y &= \frac{2\mu}{mnC_0\sqrt{\pi}} \left(2 - \gamma + \beta \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}}\right) \left(\frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x}\right) \\ &+ \beta \frac{3\mu}{4mnT_0} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}} \frac{\partial T}{\partial y}. \end{aligned} \quad (27)$$

Naturally, the corresponding expression of the slip velocity on the  $z$ -axis might be written in the same way transposing  $y$  and  $z$  notations. In relation (27), the tangential gradient of the normal mean velocity component appears: it was generally missing in previous approach formulae [2] and recently pointed out as necessary [32]. In the usual terms (thermal creep and  $U_y$  normal gradient) the slip coefficient and the thermal creep coefficient depend on the gas-to-wall temperature ratio  $T_0/T_w$  and on the various momentum accommodation coefficients (notably on the normal accommodation coefficient). In the usual cases where the wall is an isotropic surface ( $\alpha_y = \alpha_z$ ), coefficients  $\gamma$  and  $\beta$  are the same in the expressions of the two components  $U_y$  and  $U_z$  of the slip velocity: thus  $U_y$  and  $U_z$  refer to a unique vectorial equation for the slip velocity along the surface plane. Therefore, in any case the present model is suitable to treat a three-dimensional flow configuration.

When the reflecting surface is considered as an ideal specular reflecting surface ( $\alpha_x = \alpha_y = \alpha_z = 0$ ), two significant results are predicted from relation (27), which cannot be derived from previous models. First, when all the accommodation coefficients vanish in relation (27), the “thermal creep” vanishes too. This confirms theoretically the “thermal transpiration” qualitative explanation provided by Maxwell and Reynolds and adopted so far, considering the “thermal creep” as

resulting from a gas/surface interaction effect [2,33]. Consequently, the thermal creep should vanish when the boundary condition becomes pure geometrical condition, as it is provided by a perfect specular reflecting surface [14] where the gas does not exert any stress. Contrary to relation (27) the classical slip models predict in this case a thermal creep effect remaining anomalously present. Second, when all the accommodation coefficients vanish, the present formula (27), which is a direct calculation of the slip, leads to a correct qualitative response,

$$U_y = \frac{\mu}{mnC_0\sqrt{\pi}} \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right) \simeq \frac{\lambda_m}{\mu} \tau, \quad (28)$$

where  $\tau$  is the tangential shear stress at the wall. This result means that on a specular surface the slip velocity is practically the gas mean velocity at a distance equal to the mean free path from the wall, as phenomenologically predicted [1,9,18]. On the contrary, as soon as the Maxwell accommodation coefficient (usually associated to the tangential accommodation coefficient) vanishes, the Maxwell slip coefficient becomes infinite, and so the velocity slip remains unknown whatever the stress behavior at the wall.

#### 4.3. Comparison with experimental measurements of slip coefficient

Before comparing our slip velocity results with the Maxwell approach and with experimental results, a preliminary remark is needed. In expression (10), according to Chapman–Enskog assumption (see Ref. [9, pp. 173–175]), the viscosity coefficient derives from the well-known inverse fifth power law interaction potential (Maxwellian molecules): such a model does not lead exactly to the usual mean free path expressed by  $\lambda_m = (\mu/mn)\sqrt{\pi m/2kT_0}$ , which corresponds to the Maxwell phenomenological assumption (see Ref. [2, pp. 231, 240 and the appendix]) and which remains close to the hard sphere model mean free path. Therefore, it is necessary to correct the viscosity coefficient appearing in the present slip velocity calculations using a factor  $3\pi/2$  in order to be consistent with the formal  $\lambda_m$  expression. This is obtained by fitting both the Maxwell slip velocity and the present slip expression in the case of diffuse reflection where the Maxwell expression is known to give satisfactory results [14]. Then, from the slip velocity relation (27) a slip length can be deduced

$$\zeta_0 = \frac{3\mu\sqrt{\pi}(2 - \gamma + \beta(\pi/2)\sqrt{T_0/T_w})}{mnC_0(4 - \gamma + \beta\sqrt{T_0/T_w})}. \quad (29)$$

The corresponding slip coefficient,  $\sigma_v$ , derived using relation  $\zeta_0 = \sigma_v\lambda_m$ , reads

$$\sigma_v = 3 \frac{(2 - \gamma + \beta(\pi/2)\sqrt{T_0/T_w})}{(4 - \gamma + \beta\sqrt{T_0/T_w})}. \quad (30)$$

From the interplay of the normal and the tangential accommodation coefficients one can see that the slip length from relation (29) depends slightly on the accommodation coefficients and remains close to  $\lambda_m$ . Precisely, the present relation (30) predicts that,

Table 1  
Maxwell slip coefficient calculated using expression  $(2 - \alpha_y)/\alpha_y$  for different values of  $\alpha_y$

$\alpha_y$	1	0.8	0.7	0.6	0.5	0.4	0.2	0.1
$\sigma_v$	1	1.5	1.86	2.33	3	4	9	19

Table 2  
Slip coefficient of relation (30) given for different values of  $\alpha_x$  and  $\alpha_y$

$\alpha_x$	$\alpha_y =$	1	0.9	0.8	0.7	0.5	0.4	0.1	0
1		1	1.12	1.23	1.34	1.53	1.61	1.86	1.93
0.9		1	1.11	1.22	1.32	1.50	1.59	1.82	1.88
0.7		1	1.10	1.20	1.29	1.46	1.53	1.74	1.80
0.4		1	1.09	1.28	1.24	1.38	1.45	1.62	1.67
0.1		1	1.07	1.14	1.20	1.31	1.36	1.50	1.59

Table 3  
Experimental values of slip coefficients of various gases on various surfaces [34]

He	Ne	Ar	Kr	Xe	H <sub>2</sub>	D <sub>2</sub>	CO <sub>2</sub>
1.24	1.25	1.31	1.23	1.33	1.22	1.27	—
1.49	1.56	1.46	1.39	1.38	1.37	1.41	1.24
1.53	1.59	1.33	—	—	—	1.57	—
1.02	1.71	1.35	—	—	1.46	1.37	—

when the temperature jump is negligible,  $\sigma_v$  ranges from 1 to 1.93 when the gaz/surface properties vary through the variation of the accommodation coefficient values. On the contrary, the Maxwell expression of the slip length  $((2 - \alpha_y)/\alpha_y)\lambda_m$  increases strongly for vanishing values of the Maxwell accommodation coefficient. The slip coefficient prediction based on the Maxwell type of boundary condition should be called into question as soon as the physical conditions move away from the perfect accommodation and specially for small values of the accommodation coefficients (see Tables 1 and 2).

Table 3 presents results of slip coefficient measurements carried out by Porodnov et al. [34] for various gases on various surfaces. These are direct measurements of the slip coefficient without any arbitrary fixed value of the accommodation coefficients. Table 3 shows that when the couple gaz/surface properties vary the measured slip coefficient values lie between 1 and 2. Consequently, taking into account the correction on the viscosity theoretical calculation, and so on the mean free path definition at the wall, as pointed out above, we observe that the slip coefficients predicted by relation (30) are in agreement with the experimental values of Ref. [34].

#### 4.4. Dimensional analysis in boundary layer configurations

In a boundary layer or in a microflow configuration, we analyze Eq. (27) in the same way which led to relation (20) Using the same parameters as those defined in subsection 3.3.2, supplemented with  $\eta_y = U_y/U_e$ , we obtain :

$$\begin{aligned} (4 - \gamma + \beta\sqrt{T_0^*})\eta_y = & \frac{3}{2}K_n \left(2 - \gamma + \beta\frac{\pi}{2}\sqrt{T_0^*}\right) \left(\eta^0 \frac{\partial U_y^*}{\partial x^*} + \varepsilon_h \varepsilon_n \frac{\partial U_x^*}{\partial y^*}\right) \\ & + \beta\varepsilon_h \frac{\sqrt{6\pi}}{8\mathfrak{R}} \frac{\partial T^*}{\partial y^*}. \end{aligned} \quad (31)$$

As in Eq. (20) the star-marked quantities are all of the order of 1. Moreover  $\eta^0$  is usually found in the [0.1–0.2] range. Therefore, on the basis of the previous comments, it appears that the thermal creep has generally a weight ( $\varepsilon_h/\mathfrak{R}$ ) of the same order as the weight  $\eta^0 K_n$  of the normal gradient of the tangential velocity. In usual microflow domains, the negligible effect of the tangential gradient of the normal velocity component seems confirmed. Nevertheless, it is to note that the above analysis is carried out neither for complex geometries involving strong surface curvature nor for particular motions of the wall. Such conditions have recently been mentioned as enhancing the effect of the missing terms in the usual slip formulae [32].

#### 5. Concluding remarks

Slip and jump boundary conditions at the wall were obtained analytically through a consistent approach based upon the kinetic theory. An anisotropic scattering kernel, previously derived, was employed to express the reflection law. The complete Chapman–Enskog distribution function involving the velocity gradients was used for the incoming particles. Two main aspects of the results may be pointed out. First, supplementary terms appear in the expressions of the boundary condition. In the temperature jump some terms involving various velocity gradients are present besides the normal temperature gradient term: these kinetic terms reflect the contribution to the temperature jump, provided by the gas friction against the solid surface; these viscous terms may account for the special behavior of the anisotropic reflecting surfaces. In the slip velocity the thermal creep is supplemented with new crossed gradients of the tangential velocity components, which some authors recently pointed out as missing in usual formulae. Second, in the usual terms the surface anisotropy can also be acting; thus the usual coefficients involved in the previous approaches are modified, including now three accommodation coefficients. Moreover, in the velocity slip coefficient, the wall-to-gas temperature ratio is also present.

As a result, the boundary conditions appear as a structured set of equation in which the coupling between the various gradients appears naturally. The coupling coefficient are linear combinations of the accommodations coefficient of the three momentum components. From a quantitative point of view, using dimensional analysis of the various geometrical configurations showed that some of the new

terms are of the same magnitude order as the usual terms, showing the pertinence of the present approach. Finally, the use of an incoming Chapman–Enskog distribution function requires a last comment: distribution functions involving the gas motion have rarely been employed so far to treat the thermal boundary conditions: in the 1980s Scott and Gupta [16] used a Chapman–Enskog distribution to describe the gas behavior near the wall, but in a very different conceptual frame. Their approach was based on the gas property balances between the inlet of the Knudsen layer and the area in contact with the wall. Thus, the temperature jump and the slip velocity appeared exclusively as a variation of the gas property across this layer and the wall itself was disregarded. The present approach is focused on the contact of the gas with the wall, and the influence of the Knudsen layer itself has not been realistically accounted for. The variation of the gradient through the Knudsen layer may be significant when a strong temperature difference occurs between the gas and the wall. But, in any case the present approach allows us to show the emergence of new phenomena in boundary conditions. A first comparison of the slip coefficient with experimental values partially validates the model and shows its usefulness. A complete exploitation needs theoretical and experimental investigations on the accommodation coefficient data.

**Appendix A. Notice on the detailed calculations**

Let us write simply the scattering kernel  $B(\xi', \xi)$  of relation (1) in the form

$$B(\xi', \xi) = P_x P_y P_z ,$$

where  $P_x, P_y,$  and  $P_z$  correspond to the three factors appearing in relation (1). These three factors  $P_x, P_y,$  and  $P_z$  all satisfy

$$\int_0^{+\infty} P_x d\xi_x = \int_{-\infty}^{+\infty} P_y d\xi_y = \int_{-\infty}^{+\infty} P_z d\xi_z = 1 . \tag{A1}$$

*A.1. On the calculation of  $\int_{\Omega} V^2 B(\xi', \xi) d\xi$*

At  $x = 0,$  taking into account  $U_x = 0$  it can be written

$$V^2 = (\xi - U)^2 = \xi^2 - 2\xi_y U_y - 2\xi_z U_z + U^2 ,$$

then

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} V^2 B(\xi', \xi) d\xi &= \int_{\Omega} \xi^2 B(\xi', \xi) d\xi - 2U_y \int_{\Omega} \xi_y B(\xi', \xi) d\xi \\ &\quad - 2U_z \int_{\Omega} \xi_z B(\xi', \xi) d\xi + U^2 . \end{aligned}$$

Each of the integrals appearing in the right-hand side of this latter equation can be calculated using a standard table for related integrals. Finally, remembering that

$\xi' = V' + U$ , the result may be written

$$\int_{\Omega} V^2 B(\xi', \xi) d\xi = V'^2 - \alpha_x V_x'^2 - \alpha_y V_y'^2 - \alpha_z V_z'^2 + \sigma_0 C_w^2 + \alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2$$

with  $\sigma_0 = \alpha_x + \frac{1}{2}(\alpha_y + \alpha_z)$ .

### A.2. On the calculation of $Q_{0M}$

$Q_{0M}$  is written,

$$Q_{0M} = \frac{1}{2} m \int_{\Omega'} [(\alpha_x V_x'^2 + \alpha_y V_y'^2 + \alpha_z V_z'^2) - \sigma_0 C_w^2 - \alpha_y U_y^2 - \alpha_z U_z^2] |V_x'| f_M(V') dV'.$$

The integrals required for the  $Q_{0M}$  calculation are in the form  $\int_{\Omega} V_x^k V_y^l V_z^n f_M(V) dV$ , where  $k, l, n$  are integers. These integrals can be generated using a standard integral table of the exponential function, remembering that, according to our notation,  $|V_x'| = -V_x'$  for  $V_x' \in \Omega'$ . The result reads

$$Q_{0M} = \frac{mnC_0\sigma_0}{4\sqrt{\pi}} (C_0^2 - C_w^2) - \frac{mnC_0}{4\sqrt{\pi}} (\alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2).$$

### A.3. On the calculation of $Q_{0\phi}$

$Q_{0\phi}$  is written,

$$Q_{0\phi} = -\frac{1}{2} m \int_{\Omega'} [\chi - (\alpha_x V_x'^2 + \alpha_y V_y'^2 + \alpha_z V_z'^2)] |V_x'| f_M(V') \phi(V') dV', \quad (\text{A2})$$

where  $\chi = \sigma_0 C_w^2 + \alpha_y U_y^2 + \alpha_z U_z^2$ . Writing  $\phi(V')$  in the form

$$\begin{aligned} \phi(V') = & \frac{2\lambda_c}{nkTC_0^2} \nabla T \cdot V' - \frac{4\lambda_c}{5nkTC_0^4} V'^2 \nabla T \cdot V' \\ & + \frac{2\mu}{nkTC_0^2} (V_i V_j) : \left( \frac{\partial U_i}{\partial X_j} \right) - \frac{2\mu}{3nkTC_0^2} V'^2 \nabla \cdot U \end{aligned} \quad (\text{A3})$$

the terms of  $\phi(V')$  which do not lead to vanishing integrals are the terms:

$$\frac{\partial T}{\partial x} V_x', \quad \frac{\partial T}{\partial x} V_x' V'^2, \quad V_x'^2 \frac{\partial U_x}{\partial x}, \quad V_y'^2 \frac{\partial U_y}{\partial y}, \quad V_z'^2 \frac{\partial U_z}{\partial z} \quad \text{and} \quad V'^2 \nabla \cdot U. \quad (\text{A4})$$

Then, using the relevant integral table of the form  $\int_{\Omega} V_x^k V_y^l V_z^n f_M(V) dV$ , we find from this long calculation

$$\begin{aligned} Q_{0\phi} = & \frac{\sigma_1 m \lambda_c}{20 k T_0} C_0^2 \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\mu m C_0}{k T_0 \sqrt{\pi}} \left[ \frac{\partial U_x}{\partial x} \left( \frac{\chi}{6} - \frac{3\alpha_x}{4} C_0^2 \right) - \frac{\partial U_y}{\partial y} \left( \frac{\chi}{12} + \frac{\alpha_y - \alpha_z}{8} C_0^2 \right) \right. \\ & \left. - \frac{\partial U_z}{\partial z} \left( \frac{\chi}{12} + \frac{\alpha_z - \alpha_y}{8} C_0^2 \right) \right]. \end{aligned}$$

$Q_{0\phi}$  can be easily rewritten in the form given in relation (13).



**Appendix B. Energy accommodation coefficient when  $f^-(V') = f_M(V')$ ,  $U = 0$** 

The heat energy accommodation coefficient is defined by

$$\frac{\Phi^- - \Phi^+}{\Phi^- - \Phi_d^+}, \quad (\text{B1})$$

where  $\Phi^-$  is the incoming heat flux at the wall,  $\Phi^+$  is the reflected heat flux, and  $\Phi_d^+$  is the reflected flux in the hypothetical situation of perfect accommodation to the wall.  $(\Phi^- - \Phi^+)$  is expressed exactly as in relation (4), (6) and (7). Then the particular case where  $f^-(V') = f_M(V')$  yields

$$\Phi^- - \Phi^+ = \frac{mnC_0\sigma_0}{4\sqrt{\pi}}(C_0^2 - C_w^2),$$

$(\Phi^- - \Phi_d^+)$  can be calculated in the same way, substituting the scattering kernel  $B(V', V)$  by the diffuse one,  $B_d(V', V) = \frac{2}{C_w^4\pi} V_x e^{-V^2/C_w^2}$ . It is found

$$\Phi^- - \Phi_d^+ = \frac{1}{2}m \int_{\Omega'} |V'_x| V'^2 f_M(V') dV' - mC_w^2 \int_{\Omega'} |V'_x| f_M(V') dV'$$

and finally,

$$\Phi^- - \Phi_d^+ = \frac{mnC_0}{2\sqrt{\pi}}(C_0^2 - C_w^2).$$

Consequently in this case the energy accommodation coefficient equals  $\sigma_0/2$ .

**References**

- [1] M.G. El Hak, *Mec. Ind. (Rev.)* 2 (2001) 313.
- [2] J.C. Maxwell, *Philos. Trans. R. Soc. London* 170 (1878) 231.
- [3] A. Kruger, A.J. Larmit, M.D. Wit, in: *Proceedings of the Seventh International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, 1970, pp. 1015–1022.
- [4] A. Beskok, G.E. Karniadakis, *AIAA J. Thermophys. Heat Transfer* 8 (1994) 647.
- [5] C.M. Huang, R.V. Tompson, T.K. Ghosh, I.N. Ivchenko, S.K. Loyalka, *Phys. Fluids* 11 (1999) 1662.
- [6] P. Welander, *Arkiv Fysik* 7 (1954) 507.
- [7] Y. Sone, T. Ohwada, K. Aoki, *Phys. Fluids A Fluid Dyn.* 1 (1989) 363.
- [8] E.H. Kennard, *Kinetic Theory of Gases*, McGraw-Hill, New York, 1938.
- [9] S. Chapman, T. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, third ed., Cambridge Mathematical Library, 1970.
- [10] I. Ahmed, A. Beskok, *J. Thermophys. Heat Transfer* 16 (2002) 161.
- [11] Y.S. Ju, *J. Heat Transfer* 122 (2000) 817.
- [12] N.G. Hadjiconstantinou, *J. Heat Transfer* 125 (2003) 944.
- [13] M.N. Kogan, *Prog. Aerospace Sci.* 29 (1992) 271.
- [14] C. Cercignani, *Mathematical Methods in Kinetic Theory*, second ed., Plenum Press, New York, 1990, p. 98 (Chapter 4).
- [15] M.V. Smoluchowski, *Wied. Ann.* (1899) 101.
- [16] R.N. Gupta, C.D. Scott, J.N. Moss, *AIAA Paper* 84 (1984) 1732.
- [17] H. Grad, *Commun. Pure Appl. Math.* 2 (1949) 331–407.
- [18] S.A. Schaaf, P.L. Chambré, *Flow of Rarefied Gases*, Princeton University Press, Princeton, NJ, 1961.
- [19] Y. Bayazitoglu, G. Tunc, *J. Thermophys. Heat Transfer* 16 (2002) 472.

- [20] C. Cercignani, R. Illner, M. Pulvirenti, *The Mathematical Theory of Dilute Gases*, Springer, Berlin, 1994.
- [21] I. Kuscer, in: *International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, vol. E1, Gottingen, 1974, pp. 1–21.
- [22] S. Nocilla, *Meccanica* 2 (1967) 34.
- [23] S.F. Shen, *Entropie* 18 (1967) 138.
- [24] S.K. Dadzie, J.G. Meolans, *J. Math. Phys.* 45 (2004) 1804.
- [25] M. Larini, Ph.D. Thesis, Université de Provence, 1973.
- [26] L. Aufrère, J.G. Méolans, *C. R. Acad. Sci. Paris, Mécanique Fluides/Fluids Mech.* t.329 (2001).
- [27] R.N. Gupta, C.D. Scott, *AIAA J. Thermophys. Heat Transfer* 10 (1996) 190.
- [28] M. Larini, R. Brun, *Int. J. Heat Mass Transfer* 16 (1973) 2189.
- [29] R. Brun, *Transport et relaxation dans les écoulements gazeux*, Masson, 1986.
- [30] J.J. Bertin, *Hypersonic Aerothermodynamics*, AIAA, New York, 1994.
- [31] G.E. Karniadakis, A. Beskok, *Micro Flows, Fundamentals and Simulation*, Springer, Berlin, 2001.
- [32] D.A. Lockerby, J.M. Reese, D.R. Emerson, R.W. Barber, *Phys. Rev. E* 70 (2004) 017303.
- [33] O. Reynolds, *Phil. Trans. R. Soc. London* 2 (1879).
- [34] B.T. Porodonov, P.E. Suetin, S.F. Borisov, V.D. Akinshin, *J. Fluid Mech.* 64 (1974) 417.

# Slip length and problem of anomalous velocity profile

S. Kokou Dadzie \* and J. Gilbert Méolans\*

*Université de Provence, IUSTI-UMR CNRS 6595, Marseille, 13453, France*

The most used expression for the slip length in the slip flow regime where slip conditions are needed for flow prediction comes from a Maxwell description of kinetic boundary conditions and depends on one coefficient only. Even if generally associated to the tangential accommodation coefficient, this coefficient equals any kind of kinetic property accommodation coefficients. The slip length so predicted by Maxwell increases strongly for the small values of the Maxwell accommodation coefficient whereas it seems, according to experiments that the slip length keeps a finite value and remains of the mean free path magnitude order. In addition, this enhancement of the Maxwell slip length for the small values of the Maxwell accommodation coefficient leads to some anomalous behaviors in theoretical flow predictions such as the so called "inverted velocity profile in the cylindrical Couette flow of rarefied gas". In this work, we consider the calculation of the slip velocity based on another modelling of the gaz/surface interaction which involves distinguishable accommodation coefficients for the normal and the tangential momentum components. The result shows that the slip length remains in the magnitude order of the mean free path when the values of the various momentum accommodation coefficients are varying. Then, the flow anomalous behaviors exhibited in flow fields where the boundary effects become important should be due to the unsuitable application of the Maxwell diffuse-specular boundary conditions for small values of the Maxwell accommodation coefficient. These anomalous behaviors should disappear when more accurate description of the boundary conditions was used.

## Nomenclature

$x, y, z$	the three cartesian coordinates with $x$ surface normal axis
$\alpha$	Maxwell unique accommodation coefficient
$\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$	the three accommodation coefficients of the three momentum components
$m$	particle molecular mass
$k$	Boltzmann constant
$\mu$	shear viscosity
$T_w$	surface (or wall) temperature
$T_0$	gas temperature in contact with the wall, $x = 0$
$\xi(\xi_x, \xi_y, \xi_z)$	particle real velocity
$U(U_x, U_y, U_z)$	mean velocity
$V(V_x, V_y, V_z)$	particle peculiar velocity, $\xi = V + U$
$\lambda_m$	mean free path
$\lambda_c$	heat conductivity
$\sigma_v$	slip coefficient
$\zeta_0$	slip length
<i>Superscript</i>	
$\xi', V'$	incoming particle velocity at the wall: $\xi'_x < 0$ , $V'_x < 0$
$\xi, V$	reflected particle velocity at the wall: $\xi_x > 0$ , $V_x > 0$

---

\*EPUM, Département de Mécanique Energétique, 5 rue Enrico Fermi, 13453, Marseille - France

## I. Introduction

Slip regime flow treatments, using the Navier Stokes equation supplemented by slip conditions, require to preliminarily establish a slip velocity expression from kinetic theory and from gas/surface interaction description. Through lack of consistent model, the most used description of particles reflection on the surface consists in assuming that a fraction  $\alpha$  of the incident particles is reflected diffusely whereas the remaining fraction  $(1-\alpha)$  is reflected specularly. This kind of description is rather questionable in gas/surface interaction topic.<sup>1-3</sup> Thus, it is shown that the coefficient  $\alpha$  is equal to any kinetic property accommodation coefficient. That seems to be an unrealistic description of the gas/surface interaction.<sup>1</sup> Moreover, the hydrodynamic boundary conditions (slip velocity or temperature jump) derived from this kind of gas surface interaction are far from being satisfactory. Furthermore, some anomalies can be related to this kind of description: among them, the divergence of the slip coefficient and its related anomalous velocity profiles in cylindrical Couette flow especially when the interaction processes moves away from the perfectly diffuse reflection.<sup>4,5</sup>

This work deals with the slip velocity and the slip length calculations from the gas kinetic theory. A new modelling of the gas/surface interaction in which appear the various accommodation coefficients of the momentum components is used. The theoretical slip coefficient is compared with the experimental values and then the particular problem of anomalous velocity profile in cylindrical Couette flow recently pointed out by various authors is revised.<sup>4-7</sup>

## II. About slip velocity calculation

The first slip velocity, proposed by Maxwell,<sup>8</sup> was derived from the well-know diffuse-specular reflection. In addition, to determine this first slip velocity, Maxwell used a momentum balance at the wall which assumes the classical Newton law for the stress exerted by the gas on the wall. But, a real calculation of the stress exerted by the gas on the surface requires more sophisticate investigations. The Maxwell slip velocity, for isothermal flows, is written<sup>8</sup>

$$U_{s_M} = \frac{2 - \alpha}{\alpha} \frac{\mu\sqrt{\pi}}{mnC_0} \frac{\partial U_y}{\partial x} \quad (1)$$

which yields the following slip length

$$\zeta_{0_M} = \frac{2 - \alpha}{\alpha} \frac{\mu\sqrt{\pi}}{mnC_0} \quad (2)$$

and the corresponding slip coefficient,  $\sigma_v$ , derived using the relation  $\zeta_0 = \sigma_v \lambda_m$ , reads

$$\sigma_{v_M} = \frac{(2 - \alpha)}{\alpha} . \quad (3)$$

with

$$\lambda_m = \frac{\mu\sqrt{\pi}}{mnC_0} \quad (4)$$

and  $C_0^2 = \frac{2kT_0}{m}$ .

On the other hand, the slip velocity may be calculated from the basic kinetic theoretical definition of the mean velocity at the wall when the gas/surface interaction law and the incoming distribution function are known.<sup>9</sup> On this way, the Newton law assumption on the gas stress at the wall can be avoided.

### A. velocity slip calculation from another modelling of gaz/surface interaction

We describe the reflection of unstructured gas molecules at the solid surface by the following scattering kernel:<sup>10</sup>

$$B(\xi', \xi) = [(1 - \alpha_x)\delta(\xi'_x + \xi_x) + \alpha_x \frac{2\xi_x}{C_w^2} e^{-\frac{\xi_x^2}{C_w^2}}][(1 - \alpha_y)\delta(\xi'_y - \xi_y) + \alpha_y \frac{1}{C_w\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\xi_y^2}{C_w^2}}][(1 - \alpha_z)\delta(\xi'_z - \xi_z) + \alpha_z \frac{1}{C_w\sqrt{\pi}} e^{-\frac{\xi_z^2}{C_w^2}}] \quad (5)$$

where  $C_w^2 = \frac{2kT_w}{m}$ . The reflection law of the particles distribution function (5) allows a more flexible traitement of the momentum components than the Maxwell diffuse-specular reflection does with its unique coefficient. In this regard, the three coefficients  $\alpha_x$ ,  $\alpha_y$ , and  $\alpha_z$  correspond to the accommodation coefficients of the three momentum components.<sup>10</sup> On isotropic surfaces, both the tangential accommodation coefficients will be equal ( $\alpha_y = \alpha_z$ ). Knowing the reflection law of the distribution function at the surface, we calculate directly the gas macroscopic velocity in contact with the wall from the mean velocity definition given in kinetic theory, assuming an approximate expression for the incident distribution function. We choose here the complete Chapman-Enskog distribution function (which leads to the Navier Stokes equation) as the incoming distribution function expression. Even if this choice could be corrected through the Knudsen layer, in this work attention is focused on the gas/surface interaction effects and on the method used to derive the slip velocity. Thereby the incoming distribution function is written:<sup>11</sup>

$$f^- = f_M(1 + \varphi) \quad (6)$$

where  $\varphi$  reads

$$\varphi(V') = \frac{m}{kT_0} \left[ \frac{\lambda_c}{nkT_0} \nabla T \cdot V' \left(1 - \frac{2}{5C_0^2} V'^2\right) + \frac{\mu}{nkT_0} (V'_i V'_j - \frac{1}{3} V'^2 \mathbf{I}) : \frac{\partial U_i}{\partial X_j} \right]. \quad (7)$$

and  $f_M$  is the Maxwellian at the temperature  $T_0$  of the gas,  $f_M(V') = \frac{n}{(C_0\sqrt{\pi})^3} e^{-\frac{V'^2}{C_0^2}}$ .  $\mathbf{I}$  denotes the second order identity tensor, ":" denotes the double contraction of the tensorial product,  $V'_i V'_j$  and  $\frac{\partial U_i}{\partial X_j}$  are the usual second order tensors.

As a result of the calculations,<sup>9</sup> we obtain the following expression of the slip velocity

$$(4 - \gamma + \beta \sqrt{\frac{T_0}{T_w}}) U_{s_y} = \frac{2\mu}{mnC_0\sqrt{\pi}} (2 - \gamma + \beta \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}}) \left( \frac{\partial U_x}{\partial y} + \frac{\partial U_y}{\partial x} \right) + \beta \frac{3\mu}{4mnT_0} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}} \frac{\partial T}{\partial y} \quad (8)$$

where

$$\beta = \alpha_x(1 - \alpha_y), \quad \gamma = \alpha_y + \alpha_x(1 - \alpha_y) \quad (9)$$

Expression (8) represents the  $y$  component for the slip velocity; the  $z$  component is written similarly transposing the subscript  $y$  into  $z$ .

Let us note that in expression (8) the viscosity coefficient  $\mu$ , derived from the Chapman theory, should be corrected by a coefficient  $\frac{3\pi}{2}$  to be in agreement with Maxwell viscosity definition and then with the usual mean free path defined from relation (2). Thereafter this correction is taken into account.

## B. The slip length and the slip coefficient

From the slip velocity relation (8) a slip length can be deduced

$$\zeta_0 = \frac{3\mu\sqrt{\pi}}{mnC_0} \frac{(2 - \gamma + \beta \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}})}{(4 - \gamma + \beta \sqrt{\frac{T_0}{T_w}})} \quad (10)$$

the corresponding slip coefficient,  $\sigma_v$ , derived through the relation  $\zeta_0 = \sigma_v \lambda_m$ , reads

$$\sigma_v = 3 \frac{(2 - \gamma + \beta \frac{\pi}{2} \sqrt{\frac{T_0}{T_w}})}{(4 - \gamma + \beta \sqrt{\frac{T_0}{T_w}})} \quad (11)$$

In relation (10) and (11) appear the normal and the tangential momentum accommodation coefficients which carry out the gas/surface interaction process information, instead of the single coefficient presented in relation (2) and (3). It should be noted that the normal and tangential accommodation coefficients both depend on the gas properties and on the wall properties such as its roughness but are not generally equal.

### III. Comparison of theoretical slip coefficients with experimental values

Realistic measurements of the slip coefficient and of the various accommodation coefficients are rare. Expression (3) is mostly used to deduce the coefficient  $\alpha$  which is usually associated to the tangential accommodation coefficient. But, theoretically, according to the Maxwell diffuse-specular reflection law, the coefficient  $\alpha$  can mean accommodation coefficient of any kinetic property<sup>1</sup> and so this procedure can not be considered as a way toward realistic measurements of the tangential accommodation coefficient. The present theoretical calculation from relation (11) predicts, for negligible temperature jumps, that  $\sigma_v$  ranges from 1 to 1.93 when the gaz/surface properties are varying through the various accommodation coefficient values (see Table 2). On the contrary, the Maxwell slip coefficient becomes much larger when  $\alpha$  becomes small (see Table 1).

Table 3 presents the results of slip coefficient measurements carried out by *Porodnov et al.*<sup>12</sup> for various gases on various surfaces. These experimental values come from a direct measurements of the slip coefficient without any arbitrary fixed value of accommodation coefficients. According to table 3, when the gaz/surface properties are varying, the measured slip coefficient values lie between 1 and 2 approximatively. Consequently, the value range predicted for the slip coefficient in table 2 agrees with the experimental values in table 3 contrary to the Maxwell values given in table 1.

In the next section we investigate one of the problems related to the divergence of the slip length from relation (2).

$\alpha$	1	0.8	0.7	0.6	0.5	0.4	0.2	0.1
$\sigma_v$	1	1.5	1.86	2.33	3	4	9	19

Table 1. Maxwell slip coefficient calculated using relation  $\frac{2-\alpha}{\alpha}$  for various values of  $\alpha$ .

$\alpha_x$	$\alpha_y =$	1	0.9	0.8	0.7	0.5	0.4	0.1	0
1	1	1.12	1.23	1.34	1.53	1.61	1.86	1.93	
0.9	1	1.11	1.22	1.32	1.50	1.59	1.82	1.88	
0.7	1	1.10	1.20	1.29	1.46	1.53	1.74	1.80	
0.4	1	1.09	1.28	1.24	1.38	1.45	1.62	1.67	
0.1	1	1.07	1.14	1.20	1.31	1.36	1.50	1.59	

Table 2. Slip coefficient from relation (11) through the allowed values of the accommodation coefficients  $\alpha_x$  and  $\alpha_y$ .

He	Ne	Ar	Kr	Xe	H2	D2	CO2
1.24	1.25	1.31	1.23	1.33	1.22	1.27	-
1.49	1.56	1.46	1.39	1.38	1.37	1.41	1.24
1.53	1.59	1.33	-	-	-	1.57	-
1.02	1.71	1.35	-	-	1.46	1.37	-

Table 3. Experimental values of slip coefficient for various gases on various surfaces.<sup>12</sup>

### IV. On the problem of inverted velocity profile in cylindrical Couette flow

Let us consider a rarefied gas flow between two concentric cylinders separated by a few mean free paths. The inner cylinder with radius  $R_1$  is rotating at angular speed  $\omega$  and the outer cylinder with radius  $R_2$  is at rest. Because of the smallness of the distance separating the two cylinders, the behavior of such a flow should be more sensitive to the particle gas interaction with the wall, and then this flow prediction systematically depends strongly on the applied boundary conditions. The problem was studied by *Panzer et al.*<sup>4</sup> using

the Navier-stokes equation with slip boundary condition, and later by other authors by means of various methods.<sup>5,6,13</sup> All these previous works predicted an inverted velocity profile when the reflection process approaches the specular reflection at the surface. The common point in these previous works predicting inverted velocity profiles was the use of kinetic boundary condition of the Maxwell diffuse-specular type (or the use of its derived slip length (2)). Thus an inverted profile was predicted for small values of the single coefficient  $\alpha$ .

Using the Navier Stokes equation with slip boundary condition, the tangential velocity for this flow configuration reads in cylindrical coordinated  $(r, \varphi)$ ,<sup>4</sup>

$$U_\varphi(r) = ar + \frac{b}{r} \quad (12)$$

where the constants  $a$  and  $b$  involve the slip length through the following relations

$$a = \frac{A\omega}{A-B}, \quad b = -\frac{\omega}{A-B} \quad (13)$$

with

$$A = \frac{1}{R_2^2}(1 - 2\frac{\zeta_0}{R_2}), \quad B = \frac{1}{R_1^2}(1 + 2\frac{\zeta_0}{R_1}). \quad (14)$$

the derivation of the tangential velocity on the radial coordinate  $r$  yields

$$\frac{dU_\varphi(r)}{dr} = \frac{\omega}{A-B}(A + \frac{1}{r^2}) \quad (15)$$

The geometrical conditions,  $\lambda_m \ll R_1 < R_2$ , imply that  $(A - B)$  is always negative. On the first hand, when the Maxwell slip length (2) is used in relation (14) then it can be seen that, for some values of  $\alpha$ , the sign of  $(A + \frac{1}{r^2})$  may change and thus the sign of  $\frac{dU_\varphi(r)}{dr}$  changes too: that means in such a configuration, the gas will move faster close to the cylinder at rest than close to the rotating cylinder. On the other hand, analyzing the expression (15) with the slip length expression (11), in which  $\sigma_v$  ranges approximately from 1 to 2, the sign of  $\frac{dU_\varphi(r)}{dr}$  is always negative: that means the inverted velocity profile can no longer occur.

To make more clear the analysis, using the slip coefficient, the dimensionless tangential velocity can be written in the form:

$$U_\varphi^*(r^*) = \frac{R_1^*(1 - 2\frac{\sigma_v}{R_2^*})}{R_1^{*2}(1 - 2\frac{\sigma_v}{R_2^*}) - R_2^{*2}(1 + 2\frac{\sigma_v}{R_1^*})} (r^* - \frac{R_2^{*2}}{r^*(1 - 2\frac{\sigma_v}{R_2^*})}) \quad (16)$$

where the velocity is nondimensionalized with the tangential velocity of the inner cylinder  $R_1\omega$ , and spatial coordinates with the mean free path  $\lambda_m$ . Under form (16), for a fixed values of  $R_1^*$  and  $R_2^*$ , the velocity profile can be analyzed using directly the measurable slip coefficient  $\sigma_v$ , instead of the accommodation coefficients. In examples taken in the previous works,<sup>5,6,13</sup>  $R_1 = 3\lambda_m$ ,  $R_2 = 5\lambda_m$ , then the inverted profile is observed from  $\alpha = 0.1$ . In Fig. 1 where the velocity profile is plotted using the maxwell slip coefficient, like in Ref.,<sup>6,13</sup> it can be seen that the velocity profile changes strongly when the coefficient  $\alpha$  decreases. On the contrary, in Fig. 2 plotted using the slip coefficient given by relation (11) the profile variation is reduced when the slip coefficient describes its allowed value range and the inverted profile no longer appears whatever the values of the two accommodation coefficients  $\alpha_x$  and  $\alpha_y$ .

## V. Conclusion

Small scale flows prediction required a consistent and suitable choice of boundary conditions. Even if the Maxwell type of boundary conditions is the most used, it is related to some anomalousness. In this work, we considered the particular problem of slip length. Then, we derived a slip length and a slip coefficient from another kind of kinetic modelling of the boundary conditions. The novel slip coefficient was compared to the experimental values and seems to give a satisfactory agreement contrary to the Maxwell model, especially when the surface properties moves away from a perfectly diffuse surface. The so called "inverted velocity profile in Couette cylindrical rarefied gas flow", related to the Maxwell slip length, is therefore revised. The results derived from the new boundary condition predict that the slip length depends very slightly on the various accommodation coefficients and that the inverted process of the velocity profile can not appear. Consequently, some anomalous profiles previously observed in flow predictions such as the inverted profile in cylindrical Couette flow could be due to an unsuitable use of the boundary conditions of Maxwell type.

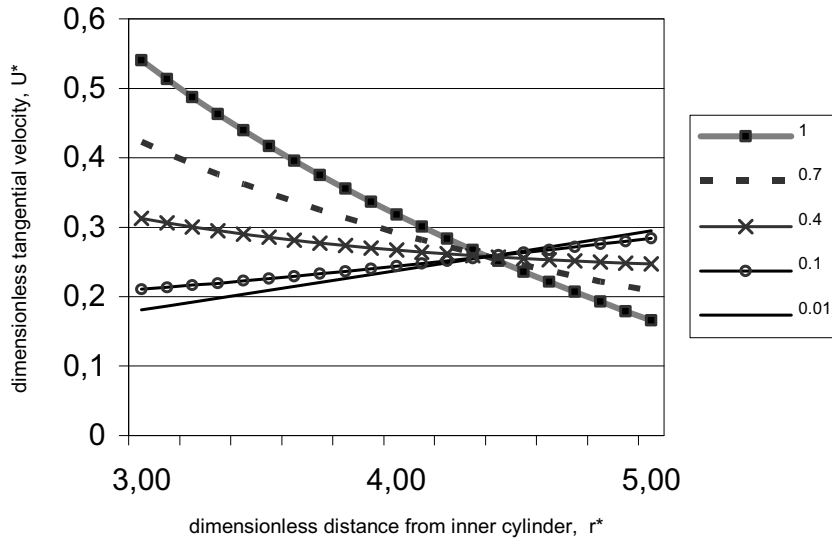


Figure 1. Velocity profiles provided by Maxwell slip coefficient.  $\alpha = 1$ ,  $\alpha = 0.7$ ,  $\alpha = 0.4$  and  $\alpha = 0.1$ . The inverted velocity profiles correspond to  $\alpha = 0.1$  and  $\alpha = 0.01$ <sup>5, 6, 13</sup>

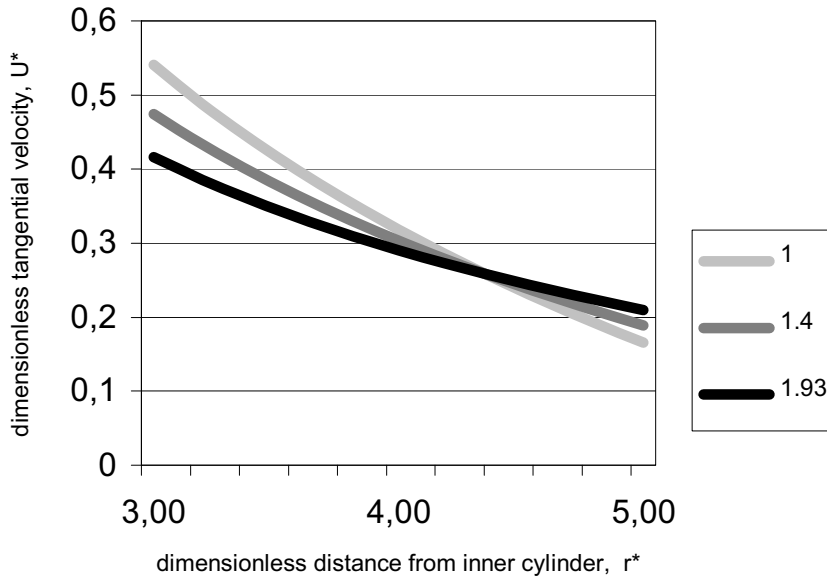


Figure 2. Velocity profiles obtained in the range of the allowed slip coefficient provided by relation (11). In this figure are plotted the profiles corresponding to  $\sigma_v = 1$ ,  $\sigma_v = 1.4$ , and the specular limit value  $\sigma_v = 1.93$



## References

- <sup>1</sup>Nocilla, S., “Basic concepts in the surface interaction of free-molecular flows or molecular beams,” *Meccanica*, Vol. 2, 1967, pp. 34.
- <sup>2</sup>Shen, S. F., “parametric representations of gas-surface interaction data and the problem of slip-flow boundary conditions with arbitrary accommodation coefficients.” *Entropie*, Vol. 18, november-december 1967, pp. 138–145.
- <sup>3</sup>Cercignani, C., Illner, R., and Pulvirenti, M., *The Mathematical Theory of Dilute Gases*, Springer-Verlag, 1994.
- <sup>4</sup>Panzer, P., Liu, M., and Einzel, D., “The effect of boundary curvature on hydrodynamic fluid flow: calculation of slip lengths,” *International Journal of Modern Physics B*, Vol. 6, No. 20, 1992, pp. 3251–3278.
- <sup>5</sup>Aoki, K., Yoshida, H., and Nakanishi, T., “Inverted velocity profile in the cylindrical Couette flow of a rarefied gas,” *Physical Review E*, Vol. 68, No. 016302, 2003, pp. 016302–1.
- <sup>6</sup>Sun, Y., Barber, R., and Emerson, D. R., “Impact of accommodation coefficient on concentric Couette flow,” *twenty-fourth International Symposium on Rarefied Gas Dynamics*, AIP, july 2004.
- <sup>7</sup>Lockerby, D. A., Reese, J. M., Emerson, D. R., and Barber, R. W., “Velocity boundary condition at solid walls in rarefied gas calculations,” *Physical Review E*, Vol. 70, No. 1, 2004, pp. 017303.
- <sup>8</sup>Maxwell, J. C., “On Stresses in Rarified Gases Arising from Inequalities of Temperature,” *Philosophical Transactions of the royal society of London*, Vol. 170, 1878, pp. 231–256.
- <sup>9</sup>Dadzie, S. K. and Meolans, J. G., “Temperature jump and slip velocity calculations from an anisotropic scattering kernel,” *Physica A*, , No. to be published, 2005.
- <sup>10</sup>Dadzie, S. K. and Meolans, J. G., “Anisotropic scattering kernel: Generalized and modified Maxwell boundary conditions,” *Journal of Mathematical Physics*, Vol. 45, No. 5, 2004, pp. 1804–1819.
- <sup>11</sup>Chapman, S. and Cowling, T., *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge Mathematical Library, third edition ed., 1970.
- <sup>12</sup>Porodonov, B. T., Suetin, P. E., Borisov, S. F., and Akinshin, V. D., “Experimental investigation of rarefied gas flows in different channels,” *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 64, No. 3, 1974, pp. 417–437.
- <sup>13</sup>Tibbs, W. K., Baras, F., and Garcia, L. A., “Anomalous flow profile due to the curvature effect on slip length,” *Physical Review E*, Vol. 56, No. 2, 1997, pp. 2282–2283.

Imprimé en France, 2008  
Edilivre – 2008  
Collection Universitaire – ISSN : 1962-1434