

Théorie cinétique des milieux poreux raréfiés: application à la dérivation d'une équation des ondes pour les gaz

Vincent PAVAN¹, IUSTI

5 rue Enrico Fermi, 13453 Marseille Cedex 13, vincent.pavan@polytech.univ-mrs.fr

1 Equation cinétique en milieux poreux raréfiés

1.1 Raréfaction dans les milieux poreux : aspect de modélisation

La notion de particule de fluide, pour laquelle on est capable de définir des grandeurs internes (vitesse, pression etc.), nécessite de regrouper, dans un même lieu géométrique, un nombre N suffisant de particules élémentaires la constituant. Il n'existe pas, dans la littérature, d'accord précis sur la valeur minimale que l'on doit donner à N pour le considérer comme suffisamment grand. Néanmoins, si l'on estime que les fluctuations statistiques des grandeurs internes doivent être environ cent fois inférieures aux variations déterministes, et si l'on veut mesurer ces dernières aux alentours du pourcent, on arrive rapidement à l'idée que l'on doit avoir $N \geq 10^8$. Dans le cas des gaz, on est alors capables de donner un ordre de grandeur concernant le volume V qu'occupe un tel nombre de particules, volume qui sera grand à l'échelle des molécules, mais petit à l'échelle du problème, permettant de définir ainsi un milieu continu et les volumes infinitésimaux qui lui sont associés (on posera $V = d\mathbf{y}$). Dans les milieux poreux pour lesquels la densité moyenne est assez faible et/ou la taille des pores très petites, il arrive alors que V ne puisse pas être très petit devant le volume caractéristique d'un pore. La conséquence immédiate en est alors qu'on ne peut plus supposer qu'à cette échelle, l'évolution du gaz puisse être décrite par des équations de type mécanique des milieux continus. De façon approximative, cela correspond à des milieux pour lequel le nombre de Knudsen local (calculé comme le rapport du libre parcours moyen sur une taille caractéristique du pore) est plus grand que 10^{-3} . Dans ces conditions, il nous faut alors changer notre modélisation du milieu poreux. L'alternative consiste à revenir à une description statistique de l'ensemble des particules contenues dans un volume V suffisamment grand, englobant donc plusieurs pores à la fois. Dans ce volume, repéré par sa position macroscopique \mathbf{y} , et à un instant donné t , on pose par $F(t, \mathbf{y}, \mathbf{v}) d\mathbf{y}d\mathbf{v}$ le nombre de particules dont la vitesse vaut \mathbf{v} à $d\mathbf{v}$ près.

1.2 equation d'évolution pour $F(\mathbf{y}, \mathbf{v}, t)$

Pour écrire une équation d'évolution sur $F(t, \mathbf{y}, \mathbf{v})$ (voir [1]), il nous faut lister les mécanismes physiques capables de faire perdre ou gagner, dans le volume $d\mathbf{y}$ entre t et $t+dt$, des particules ayant la vitesse \mathbf{v} à $d\mathbf{v}$ près. Dans les milieux non poreux, ces mécanismes sont usuellement le transport libre (qui fait entrer ou sortir des particules de vitesses \mathbf{v} à l'intérieur du volume $d\mathbf{y}$), les forces à distance exercées sur les particules et les collisions inter-particulaire, décrites par l'opérateur de Boltzmann. Dans le cadre de particules piégées dans une structure poreuse, et pour lesquelles la raréfaction n'est pas négligeable, il faut rajouter un mécanisme de collision particules parois. Ce mécanisme est quantifié grâce au noyau de collision particules/parois $\mathcal{R}(\mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v}, \mathbf{n})$, qui est par définition la densité de probabilité qu'une particule de vitesse incidente $\mathbf{v}' \cdot \mathbf{n} \leq 0$ soit ré-émise, après une collision contre un mur de normal \mathbf{n} , avec une vitesse $\mathbf{v} \cdot \mathbf{n} \geq 0$. Si l'on pose alors par $S(\mathbf{y}, \mathbf{n})$ la densité volumique de surface ayant une normale de collision \mathbf{n} (à $d\mathbf{n}$ près) définie localement à l'intérieur du volume $d\mathbf{y}$, et si $h(x)$ désigne la fonction de Heaviside, le taux de variation de particules ayant la vitesse \mathbf{v} lié aux chocs particules parois est alors donné par l'opérateur suivant :

$$\begin{aligned} W(F) &= W^+(F) - W^-(F) \\ W^+(F) &:= \int h(\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) S(\mathbf{y}, \mathbf{n}) h(-\mathbf{v}' \cdot \mathbf{n}) |\mathbf{v}' \cdot \mathbf{n}| F(t, \mathbf{y}, \mathbf{v}') d\mathbf{v}' d\mathbf{n} \\ W^-(F) &:= \int h(-\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}) S(\mathbf{y}, \mathbf{n}) |\mathbf{v} \cdot \mathbf{n}| F(t, \mathbf{y}, \mathbf{v}) d\mathbf{n} \end{aligned} \quad (1)$$

Le terme $W^+(F)$ comptant les particules qui gagnent la vitesse \mathbf{v} , et le terme $W^-(F)$ les particules qui perdent la vitesse \mathbf{v} à cause d'un choc avec les parois. Finalement, en incluant les autres mécanismes faisant varier les vitesses des particules à l'intérieur du volume $d\mathbf{y}$, on arrive à une équation de la forme :

$$\partial_t F + \mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{y}} F + \frac{\mathbf{f}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{v}} F = \frac{1}{\epsilon(\mathbf{y})} [Q(F, F) + W(F)] \quad (2)$$

où \mathbf{f} est une force à distance s'exerçant sur une particule, $\epsilon(\mathbf{y})$ la porosité locale, $Q(F, F)$ l'opérateur de Boltzmann décrivant les collisions particules/particules. Dans la suite de cet article, on choisira $\mathbf{f} = \mathbf{0}$

1.3 Caractère bien posé de l'équation cinétique

Pour pouvoir être exploitable, l'équation cinétique précédente doit posséder une entropie, c'est à dire un principe organisationnel faisant tendre, sur des échelles de temps microscopiques, la statistique $F(t, \mathbf{y}, \mathbf{v})$, vérifiant par ailleurs l'équation (2), vers une statistique d'équilibre. En l'absence d'efforts extérieurs et de gradient spatial, de façon conforme à l'intuition dans la mesure où le système de particules piégées dans le milieu poreux s'assimile alors à un système thermostaté (les parois imposant localement leur température $T_w(\mathbf{y})$ du système tandis que le volume mésoscopique $d\mathbf{y}$ reste constant), on s'attend à ce que l'énergie libre statistique définie (éventuellement hors équilibre) par :

$$H(F)(\mathbf{y}, t) := \int \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 F(t, \mathbf{y}, \mathbf{v}) d\mathbf{v} + kT_w \int (F \ln F - F) d\mathbf{v} := U(\mathbf{y}, t) - T_w S(\mathbf{y}, t) \quad (3)$$

soit une grandeur décroissante du temps tendant donc vers un minimum. On montre que c'est effectivement le cas, c'est à dire que l'on a bien l'inégalité

$$-kT_w(\mathbf{y}) \int [Q(F, F) + W(F)] [\ln(F/M_w(\mathbf{v}))] d\mathbf{v} \geq 0 \quad (4)$$

où $M_w(\mathbf{v})$ désigne la Maxwellienne à la vitesse et à la température locale (i.e. au "point" \mathbf{y}) des parois (voir [1]), inégalité s'interprétant d'ailleurs exactement selon le second principe de la thermodynamique, stipulant que $\delta W - \delta Q/T_w \geq 0$ où δW et δQ désignent localement le travail et la chaleur échangés entre les particules et les parois. D'autre part, on montre que le minimum de la fonction d'énergie libre est atteint si et seulement si $F(t, \mathbf{y}, \mathbf{v})$ est localement égale à $M_w(\mathbf{v})$. Finalement, de façon analogue à ce qui se passe pour l'équation de Boltzmann sans terme d'interaction entre les particules et les parois, on montre que l'on a les équivalences mathématiques suivantes (voir [1]) :

$$Q(F, F) + W(F) = 0 \quad \int [Q(F, F) + W(F)] [\ln(F/M_w(\mathbf{v}))] d\mathbf{v} = 0 \quad F(\mathbf{v}) = M_w(\mathbf{v}) \quad (5)$$

2 Equations de moments tirées de l'équation cinétique

2.1 Equations de moments conservées

Lorsque les efforts extérieurs sont nuls, l'équation de référence (2) possédant une entropie généralisée (l'énergie libre) et vérifiant les équivalences précédentes, on est alors en position, de façon strictement analogue à ce qui se passe pour l'équation de Boltzmann sans interaction particules/parois, d'écrire des équations de moments. Ces équations de moments peuvent être obtenues, dans un premier temps, en considérant localement les *pdf* d'équilibre (vérifiant $F(t, \mathbf{y}, \mathbf{v}) = M_w(\mathbf{v})$), que l'on intègre contre les fonctions cinétiques conservées au cours des collisions particules/particules et particules/parois. De façon assez claire, (la seule fonction cinétique conservée lors des deux types de collisions particules/particules et particules/parois étant la masse) on obtient alors une équation extrêmement pauvre sur la densité volumique de particules qui s'écrit :

$$\partial_t \rho(\mathbf{y}, t) = 0 \quad (6)$$

Cette équation est à peu près sans intérêt physique sinon par son interprétation : elle signifie simplement que si les particules sont localement à l'équilibre thermique et cinétique des parois, alors il ne peut pas y avoir de transport de masse de vitesse ou d'énergie dans le milieu considéré. Par contraposé, on comprend alors que n'importe quelle forme de transport dans les milieux poreux raréfiés correspond localement à une *pdf* qui n'est pas celle de l'équilibre thermodynamique local. Prenant donc acte que les grandeurs locales telles que la température ou la vitesse puissent être différentes de celles des parois, on se redonne un moyen de décrire des équations de transports en milieux poreux raréfiés, à condition de pouvoir avoir localement une forme pour la *pdf*. Pour cela, il faut alors distinguer deux cas antagonistes : soit le déséquilibre thermodynamique est faible et on s'attend, conformément à la théorie des petits déséquilibres, à décrire des phénomènes de transport diffusifs, en particulier sur la masse ; soit le déséquilibre thermodynamique est important, et l'on s'attend alors plutôt à décrire des transports de type hyperbolique avec des termes dissipatifs sur les quantités transportées, qu'il s'agisse de la quantité de mouvement ou de l'énergie.

2.2 transport parabolique sur les moments conservés

Il est possible de montrer que l'opérateur de collision cinétique nous permettant de décrire simultanément des collisions particules/particules et particules/parois ($Q(F, F) + W(F)$) est bien posé pour le développement d'une approximation de type Chapman/Enskog ([2]). Ainsi, de façon analogue à ce que l'on connaît déjà pour les milieux non poreux lorsqu'un développement en petites perturbations de Chapman-Enskog permet de trouver les termes de transport diffusifs associés aux équations de transport sur la quantité de mouvement et l'énergie (ce sont les équations de Navier-Stokes et Fourier), une procédure de type Chapman-Enskog sur l'équation cinétique poreuse (2) permet de retrouver une équation de transport parabolique sur la masse en milieux poreux raréfiés s'écrivant selon :

$$\partial_t \rho(\mathbf{y}, t) = -\nabla_{\mathbf{y}} \cdot (\mathbf{D}_n \nabla_{\mathbf{y}} \rho(\mathbf{y}, t)) + \nabla_{\mathbf{y}} \cdot (\mathbf{D}_T \nabla_{\mathbf{y}} T_w(\mathbf{y}, t)) \quad (7)$$

où les deux termes du second membre correspondent respectivement à la diffusion de Knudsen et à la transpiration thermique.

2.3 Transport hyperbolique sur les moments non conservés

Lorsque les déséquilibres thermodynamiques deviennent plus important, en particulier lorsque le système est soumis à des gradients non négligeables, il n'est plus possible d'obtenir localement une estimation de la *pdf* par un développement perturbatif de type Chapman/Enskog. On peut néanmoins utiliser les idées de la Rational Extended Thermodynamics ([4]) de façon avantageuse : puisque le système est simultanément contraint à évoluer vers le minimum de son énergie libre, mais puisque ses moments ne sont plus imposés localement par les parois du fait de l'existence de fortes perturbations extérieures, il semble légitime de chercher non plus le minimum absolu de l'énergie libre, mais son minimum sous la contrainte des moments imposés par l'extérieur. Si l'on décide alors de donner localement à la particule de fluide une vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{y}, t)$ et une température $T(\mathbf{y}, t)$ possiblement différentes de celles des parois, on obtient alors que le minimum de son énergie libre sous la contrainte des moments s'écrit (voir [1]) :

$$F(t, \mathbf{y}, \mathbf{v}) = \frac{\rho(\mathbf{y}, t)}{(2\pi kT(\mathbf{y}, t)/m)^{3/2}} \exp\left(-\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u}(\mathbf{y}, t))^2}{2kT(\mathbf{y}, t)}\right) \quad (8)$$

En intégrant alors l'équation cinétique (2) contre les moments 1, \mathbf{v} , \mathbf{v}^2 lorsque $F(t, \mathbf{y}, \mathbf{v})$ est donnée par (8) on obtient alors une série d'équation de moments, données par les équations suivantes :

$$\partial_t \rho + \nabla_{\mathbf{y}} \rho \mathbf{u} = 0 \quad (9)$$

$$\partial_t \rho \mathbf{u} + \rho \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{y}} P = \epsilon^{-1}(\mathbf{y}) \int W(F) \mathbf{v} d\mathbf{v} \quad (10)$$

$$\partial_t \left(\rho \mathbf{u}^2 + \frac{3\rho k_B T}{m} \right) + \nabla_{\mathbf{y}} \left(\rho \mathbf{u}^2 + \frac{5\rho k_B T}{m} \right) \mathbf{u} = \epsilon^{-1}(\mathbf{y}) \int W(F) \mathbf{v}^2 d\mathbf{v} \quad (11)$$

2.4 Equation des ondes en milieux poreux raréfiés

Les termes dans les seconds membres des équations sur la quantité de mouvement et l'énergie décrivent l'influence du milieu poreux sur le transport de la vitesse et de l'énergie. Dans tous les cas, on peut montrer ([1],[3]) que ce sont des termes dissipatifs qui tendent à ramener localement vitesse et température vers ceux des parois. Pour les vitesses de transport pas trop grande ($\mathbf{u}^2 < kT_w/m$), on peut montrer que les termes dissipatifs admettent des approximations respectivement à l'ordre 1 et à l'ordre 0 en \mathbf{u} . Un étude a pu être menée dans le cadre de l'équation de l'énergie ([2]). Elle indique que la température du gaz tend à revenir vers celle de la paroi sur des temps caractéristique très court, si bien que l'on peut toujours quasiment se placer dans le cadre d'un équilibre thermique local et considérer que la vitesse du gaz est toujours localement celle des parois. Dans ces conditions, il ne reste que les équations sur la masse et la quantité de mouvement qui s'écrivent simplement selon :

$$\partial_t \rho + \nabla_{\mathbf{y}} \rho \mathbf{u} = 0 \quad (12)$$

$$\partial_t \rho \mathbf{u} + \rho \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{y}} \mathbf{u} + \nabla_{\mathbf{y}} P = -\rho \mathbf{M} \mathbf{u} \quad (13)$$

où \mathbf{M} est une matrice symétrique définie positive qui ne dépend localement que de la géométrie du milieu poreux par l'intermédiaire de la porosité et de la fonction géométrique $S(\mathbf{y}, \mathbf{n})$. Finalement, en poursuivant le travail de linéarisation des équations, on peut, de façon strictement identique à ce que l'on sait faire pour tirer l'équation des ondes à partir des équations d'Euler du gaz parfait tirer une équation des ondes pour le gaz raréfié parfait en milieu poreux. Dans le cas où le système considéré est isotrope, et toujours dans l'hypothèse d'équilibre thermique local, on se retrouve alors avec une équation sur la masse volumique s'écrivant selon :

$$\partial_{tt} \rho + M \partial_t \rho - \frac{kT_w}{m} \Delta \rho = 0 \quad (14)$$

Où tous les coefficients sont explicit en fonction de la géométrie et des interactions particules/parois décrites d'après le noyau de collision. Cette équation que l'on vient de trouver rejoint en tout point celle dériver phénoménologiquement par ([5]) et qui s'écrit selon :

$$\partial_{tt} \rho + \frac{\sigma \epsilon}{sm\rho_0} \partial_t \rho - \frac{k}{sm\rho_0} \Delta \rho = 0 \quad (15)$$

La simplification majeure venant, dans notre cas, du terme $\frac{k}{sm\rho_0}$ qui se réduit à $\frac{kT_w}{m}$. La raison essentielle en est le résultat d'équilibre thermique local que nous avons introduit dans les équations. Si cette hypothèse venait à tomber, alors on obtient une expression plus compliqué pour le coefficient multipliant le laplacien.

Références

- [1] Pavan V, Oxarango L, A New Momentum Equation for Gas Flow in Porous Media : The Klinkenberg Effect Seen Through the Kinetic Theory ,Journal of Statistical Physics, Vol. 126, No. 2, January 2007
- [2] Pavan V, Chastanet J, Gas/Solid heat transfers in gas flows under Klinkenberg conditions : comparison between the homogenisation and the kinetic approaches, to be published in the Journal of Porous Media.

- [3] Knudsen diffusion in rarefied porous media, submitted to Continuum Mechanics and Thermodynamics
- [4] I. Müller and T. Rugeri, Rational Extended thermodynamics, Springer-Verlag, New York 1993
- [5] Fahy F., foundations of Engineering acoustics, ISBN 0-12-247665-4, Academic Press - Amsterdam, 2001