

Chapitre 3

Descriptions microscopiques, mésoscopiques et macroscopiques

Les adjectifs *microscopique*, *mésoscopique* et *macroscopique* ont des significations très différentes selon les contextes et les auteurs. Ici, nous ne les emploierons que pour caractériser un mode de description de l'état d'un système. Il n'est donc pas question d'échelle : un même système, quelque soit sa dimension ou son nombre de corpuscules, pourra être décrit à l'aide de variables d'état microscopiques, mésoscopiques ou macroscopiques en fonction du type et du niveau d'information souhaité. Les descriptions mésoscopiques et macroscopiques sont fondées sur des raisonnements statistiques qui sont souvent difficile à maîtriser, notamment en ce qui concerne les propriétés associées à l'hypothèse d'un grand nombre de corpuscules, ou à celle d'un grand nombre de répétitions d'expérience (parfois avec un seul corpuscule). Dans un premier temps, nous nous placerons dans la configuration la plus simple d'accès, celle correspondant à un gaz de particules quasi-ponctuelles dans les conditions de validité de l'hypothèse d'un milieu continu, c'est à dire dans les conditions de validité de la mécanique des fluides usuelle. Une généralisation des modes de description statistiques sera proposée ultérieurement, au chapitre 9.

Description microscopique Si on admet que les N particules constituant le gaz étudié sont assimilables à des particules ponctuelles de masse m , alors à un instant t l'état de chaque particule indexée i est entièrement défini par sa position $\vec{r}_i(t)$ et sa vitesse $\vec{c}_i(t)$. La description microscopique de l'état du gaz implique donc $2N$ vecteurs (les N positions et les N vitesses) : $2N$ fonctions de la seule variable t .

Description macroscopique Nous admettrons pour l'instant que d'un point de vue macroscopique l'état du gaz est entièrement déterminé par la connaissance des champs de densité de particules η (ou de masse volumique ρ), de vitesse \vec{v} et de température T . Nous laissons de côté la question de la pression qui sera abordée au chapitre 10. On peut par exemple admettre temporairement que (sous l'hypothèse d'équilibre thermodynamique local) la pression est une fonction de ρ et T correspondant à l'équation d'état du gaz à l'équilibre. Nous utilisons le concept de densité dans son acceptation la plus usuelle. Le nombre de particules dN situées à l'instant t dans un volume élémentaire $d\vec{r}$ autour de la position \vec{r} est relié à la densité de particules $\eta(\vec{r}, t)$ par l'équation

suivante (voir la figure 3.1) :

$$dN = \eta(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (3.1)$$

De même, la masse dM de toutes les particules situées dans $d\vec{r}$ à t est reliée à la masse volumique $\rho(\vec{r}, t)$ par

$$dM = \rho(\vec{r}, t) d\vec{r} \quad (3.2)$$

et si toutes les particules sont identiques, de masse m , la densité de masse et la densité de particules sont reliées par

$$\rho(\vec{r}, t) = m\eta(\vec{r}, t) \quad (3.3)$$

Le vecteur vitesse $\vec{v}(\vec{r}, t)$ utilisé dans une description macroscopique usuelle correspond à la valeur moyenne des vitesses \vec{c}_i des particules situées dans le voisinage de la position \vec{r} à l'instant t . Nous noterons pour l'instant

$$\vec{v}(\vec{r}, t) = \langle \vec{c}_i(t) \rangle_{\vec{r}} \quad (3.4)$$

En particulier, un gaz arrêté vérifie $\vec{v}(\vec{r}, t) = \vec{0}$ ce qui ne signifie pas que les particules autour de \vec{r} ont toutes une vitesse nulle, mais seulement que la valeur moyenne de leurs vecteurs vitesse est nulle. Pour de l'air arrêté à pression et température ambiante, le gaz a toutes les apparences d'un fluide immobile, la vitesse macroscopique \vec{v} est nulle, mais les particules d'azote ont en moyenne des modules de vitesse de l'ordre de 400m/s . La vitesse du son est un exemple de manifestation de ces vitesses particulières. On retiendra que la vitesse macroscopique ne contient aucune information concernant cette agitation moléculaire et qu'il est toujours possible d'effectuer un changement de repère de façon à imposer que la vitesse particulière moyenne $\vec{v}(\vec{r}, t)$ soit nulle (se placer dans le repère du centre de masse). La température est par contre une mesure de cette agitation. A une constante près, la température correspond à la variance de la distribution des vitesses particulières (la moyenne des carrés des écart à la moyenne, c'est à dire la moyenne des carrés des vitesses particulières dans le repère du centre de masse) :

$$\frac{3}{2}k_B T(\vec{r}, t) = \frac{1}{2}m \left\langle [\vec{c}_i(t) - \langle \vec{c}_i(t) \rangle_{\vec{r}}]^2 \right\rangle_{\vec{r}} = \frac{1}{2}m \left\langle [\vec{c}_i(t) - \vec{v}(\vec{r}, t)]^2 \right\rangle_{\vec{r}} \quad (3.5)$$

Le coefficient $\frac{1}{2}m$ permet d'interpréter également le second terme de l'équation précédente comme la moyenne de l'énergie cinétique de translation des particules dans le voisinage de la position \vec{r} (et non pas seulement comme la variance de la distribution des vitesses) et la constante k_B qui relie la température à cette énergie cinétique moyenne est la constante de Boltzmann ($k_B = 1.381 \cdot 10^{-23} \text{J K}^{-1}$). On peut donc donner plusieurs lectures de la description macroscopique de l'état d'un gaz à partir des champs $\eta(\vec{r}, t)$, $\vec{v}(\vec{r}, t)$ et $T(\vec{r}, t)$ (ou $\rho(\vec{r}, t)$, $\vec{v}(\vec{r}, t)$ et $T(\vec{r}, t)$), mais on retiendra avant tout que cette description implique trois fonctions des deux variables indépendantes \vec{r} et t et qu'il s'agit de la caractérisation de la distribution spatiale des positions des particules (à travers le champ de densité) et d'informations restreintes concernant la distribution des vitesses particulières (à travers les champs de vitesse moyenne et de température). Par rapport à une description microscopique, non seulement nous n'avons plus accès à la position et à la vitesse de chaque particule, puisque nous raisonnons en termes de distributions, mais nous avons également perdu beaucoup d'information concernant la distribution des vitesses en chaque point puisque nous ne connaissons plus que sa valeur moyenne, \vec{v} , et sa variance (à travers T).

Description mésoscopique Nous parlerons de description mésoscopique dès lors qu'il s'agira de caractériser statistiquement la distribution des particules dans l'espace des phases, c'est à dire l'espace dans lequel chaque point correspond à un état possible pour chacune des particules. Dans notre exemple d'un gaz de particules quasi-ponctuelles, l'espace des phase est $\mathcal{R} \times \mathcal{C}$, où \mathcal{R} est l'espace des positions et \mathcal{C} l'espace des vitesses. Selon la description microscopique précédente, la i -ième particule est bien caractérisée par un point dans l'espace des phases, soit $(\vec{r}_i(t), \vec{c}_i(t))$, c'est à dire un point dans un espace de dimension 6. La donnée, dans cet espace, des N points correspondant aux états des N particules du gaz est une représentation possible de l'état microscopique. Dans la représentation mésoscopique, les particules ne sont plus repérées individuellement et on ne s'intéresse qu'à la distribution de leurs états dans l'espace des phases. La grandeur descriptive utilisée est la **densité de particules dans l'espace des phases**. Elle est notée $f(\vec{r}, \vec{c}, t)$ et est appelée **fonction de distribution**. Il s'agit d'une densité au même titre que η dans l'équation 3.1. Mais nous sommes ici dans l'espace $\mathcal{R} \times \mathcal{C}$, c'est à dire que le nombre de particules dN situées à l'instant t dans un volume élémentaire $d\vec{r}$ autour de la position \vec{r} (dans l'espace des positions \mathcal{R}), ayant une vitesse comprise dans un volume élémentaire $d\vec{c}$ autour de la vitesse \vec{c} (dans l'espace des vitesses \mathcal{C}), est relié à f par l'équation suivante :

$$dN = f(\vec{r}, \vec{c}, t) d\vec{r} d\vec{c} \quad (3.6)$$

$f(\vec{r}, \vec{c}, t)$ est une densité de particules au point (\vec{r}, \vec{c}) et le produit $d\vec{r} d\vec{c}$ est un volume élémentaire autour de ce point (voir la figure 3.3). La connaissance du champs de f nous donne accès à l'intégralité de l'information concernant la distribution statistique des positions et des vitesses particulières (sachant que nous abandonné l'objectif de repérer individuellement, de discerner les particules). Il s'agit donc d'un mode de description très proche du mode de description macroscopique. La différence est que dans la description macroscopique précédente nous disposions de l'intégralité de l'information concernant la distribution statistique des positions des particules (grâce à η) mais nous ne connaissions en tout point que la valeur moyenne (\vec{v}) et la variance (par l'intermédiaire de T) de la distribution des vitesses particulières. Dans une description mésoscopique nous disposons, en chaque point, de la totalité de l'information statistique concernant la distribution des vitesses : il suffit de fixer \vec{r} et de faire varier \vec{c} dans la fonction de distribution $f(\vec{r}, \vec{c}, t)$ (voir la figure 3.3). Cela implique en particulier que nous pouvons exprimer simplement la densité η , la vitesse macroscopique \vec{v} et la température T à partir de la fonction de distribution. Le fait que la densité soit l'intégrale de la fonction de distribution est une conséquence directe des définitions :

$$\eta(\vec{r}, t) = \int f(\vec{r}, \vec{c}, t) d\vec{c} \quad (3.7)$$

Pour la vitesse moyenne et la température il suffit de partir des équations et et d'observer que $\frac{f(\vec{r}, \vec{c}, t)}{\eta(\vec{r}, t)}$ est la densité de probabilité de la vitesse des particules situées au voisinage du point \vec{r} . La moyenne $\langle g(\vec{c}_i(t)) \rangle_{\vec{r}}$ de n'importe quelle fonction g de la vitesse particulière s'écrit alors

$$\langle g(\vec{c}_i(t)) \rangle_{\vec{r}} = \int \frac{f(\vec{r}, \vec{c}, t)}{\eta(\vec{r}, t)} g(\vec{c}) d\vec{c} \quad (3.8)$$

ce qui conduit à

$$\vec{v}(\vec{r}, t) = \frac{1}{\eta(\vec{r}, t)} \int f(\vec{r}, \vec{c}, t) \vec{c} d\vec{c} \quad (3.9)$$

et

$$\frac{3}{2}k_B T(\vec{r}, t) = \frac{1}{\eta(\vec{r}, t)} \int f(\vec{r}, \vec{c}, t) \frac{1}{2}m [\vec{c} - \vec{v}(\vec{r}, t)]^2 d\vec{c} \quad (3.10)$$

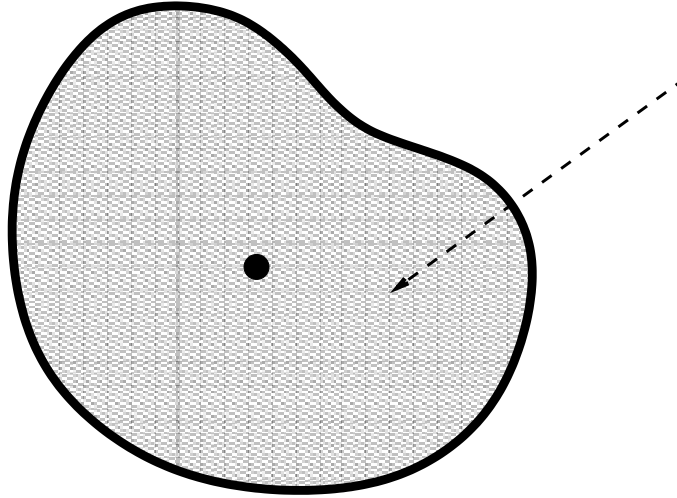


FIG. 3.1 – Volume élémentaire $d\vec{r}$ autour de la position \vec{r} .

Ordre hiérarchique des descriptions Dirac

Densités surfaciques de flux net Le vecteur densité surfacique de flux net de particules $\vec{j}(\vec{r}, t)$ permet d'exprimer le nombre dN de particules traversant, pendant un interval de temps élémentaire dt , une surface élémentaire $d\vec{r}$ autour de la position \vec{r} , sur une surface Σ donnée passant par \vec{r} , en comptant positivement les particules traversant Σ dans le sens de la normale $\vec{n}_\Sigma(\vec{r})$ et en comptant négativement les particules traversant en sens inverse (voir la Fig. 3.2) :

$$dN = \vec{j}(\vec{r}, t) \cdot \vec{n}_\Sigma(\vec{r}) d\vec{r} dt \quad (3.11)$$

Le vecteur densité surfacique de flux net de masse $\vec{j}_m(\vec{r}, t)$ joue le même rôle en ce qui concerne la masse avec

$$\vec{j}_m(\vec{r}, t) = m\vec{j}(\vec{r}, t) \quad (3.12)$$

Remarque

$$\vec{j}_{th}(\vec{r}, t) = \int f(\vec{r}, \vec{c}, t) \frac{1}{2} m (\vec{c} - \vec{v}(\vec{r}, t))^2 (\vec{c} - \vec{v}(\vec{r}, t)) d\vec{c} \quad (3.13)$$

Remarque $\vec{j} = \eta\vec{v}$ et $\vec{j}_m = \rho\vec{v}$ donc, en termes de flux de particules ou de flux de masse, tout se passe comme si les particules se déplaçaient toutes à la vitesse moyenne (apparence de la particule fluide).

Penser à renvoyer vers le chapitre 10 pour la pression.

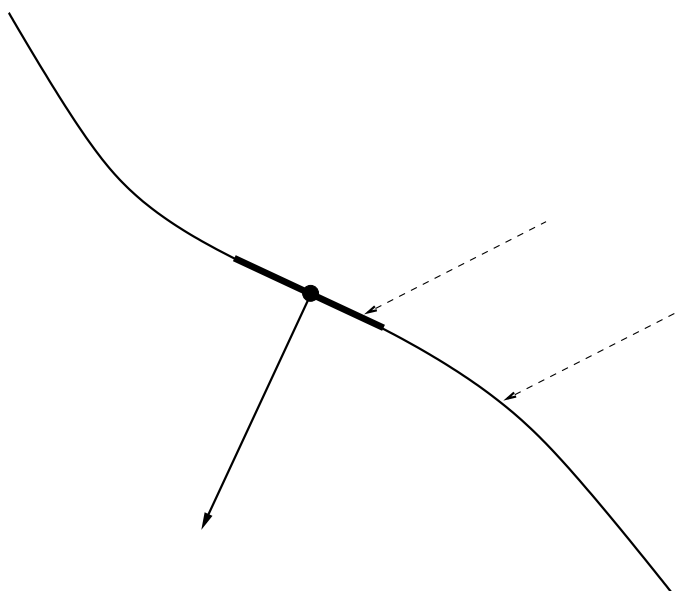


FIG. 3.2 – Surface élémentaire $d\vec{r}$ autour de la position \vec{r} sur une surface Σ passant par \vec{r} . Le vecteur $\vec{n}_\Sigma(\vec{r})$ est un vecteur unitaire normal à Σ en \vec{r} qui définit le choix d'orientation retenu pour les flux nets à travers Σ .

FIG. 3.3 – illustration de f comme densité dans un espace 1D en faisant référence aux poissons du chapitre d'illustration. Penser à représenter la densité de proba des vitesses en un point.