ANNALES DE L'I. H. P., SECTION A

ANDRÉ BERROIR

Contribution à la théorie cinétique des gaz polyatomiques. Deuxième partie

Annales de l'I. H. P., section A, tome 12, nº 2 (1970), p. 117-182
<http://www.numdam.org/item?id=AIHPA_1970__12_2_117_0>

© Gauthier-Villars, 1970, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la revue « Annales de l'I. H. P., section A » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (http://www.numdam.org/conditions). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM
Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
http://www.numdam.org/

Ann. Inst. Henri Poincaré,
Vol. XII, n° 2, 1970, p. 117-182.

Section A :
Physique théorique.

Contribution à la théorie cinétique des gaz polyatomiques

DEUXIÈME PARTIE

par

André BERROIR

RÉSUMÉ. — Cet article fait suite à un article précédent dans lequel a été établie et étudiée une équation de Boltzmann pour certaines classes de modèles de gaz polyatomiques.

Pour ces mêmes modèles, la méthode de Chapman-Enskog est utilisée ici pour trouver les solutions normales. Une technique d'intégration est développée pour la résolution des équations de Fredholm et la détermination des coefficients de transport.

ABSTRACT. — This paper follows another one in which a Boltzmann equation was established and studied for certain classes of molecular models. Here, the Chapman-Enskog method is used in order to obtain normal solutions. An integration technique is developed to solve the Fredholm equations and calculate transport coefficients.

TABLE DES MATIÈRES

PREMIÈRE PARTIE (Rappel) (*)

INTRODUCTION

CHAPITRE 1. — Sur les chocs moléculaires

CHAPITRE 2

2.1. Équation de Liouville

2.2. Passage à une équation de Boltzmann

(*) Cf. *Ann. I. H. P.*, A-XII-1, 1970.

2.3. Équations de variation
2.4. Le théorème H
2.5. La distribution maxwellienne
2.6. Les équations de conservation

DEUXIÈME PARTIE

CHAPITRE 3

3.1. RECHERCHE DES SOLUTIONS NORMALES DE L'ÉQUATION DE BOLTZMANN . . . 119
3.1.1. Méthode 119
3.1.2. Résolution de $\mathcal{J}(f^{(0)}, f^{(0)}) = 0$ 120
3.1.3. Calcul du second membre de (3) 123
3.1.4. Cas particulier important 125
3.1.5. Étude du premier membre de (3) et (4) 125
3.1.6. Détermination de $\varphi^{(1)}$ 129
3.1.7. Restriction du problème 136

3.2. TECHNIQUE DE L'INTÉGRATION 138

3.3. ÉTUDE DU TENSEUR DES PRESSIONS ET DU VECTEUR FLUX D'ÉNERGIE . . 143
3.3.1. Définitions 143
3.3.2. Calcul de $\mathbf{p}^0$ et q^0 144
3.3.3. Calcul de $\mathbf{p}^1$ et q^1 144
3.3.4. Conclusion 150

CHAPITRE 4

4.1. RESTRICTION DU DOMAINE D'INTÉGRATION 151

4.2. LES MODÈLES DE MOLÉCULES 151
4.2.1. Molécules rigides 152
4.2.2. Molécules à un degré de vibration 153
4.2.3. Modèles « de révolution » 155

4.3. LES MODÈLES DE COLLISIONS 158
4.3.1. Collisions conduisant à un modèle $\mathfrak{M}$ 158
4.3.2. Collisions conduisant à un modèle $\mathfrak{M}^*$ 159
4.3.3. Résumé 160

4.4. LES FONCTIONS ORTHOGONALES 160
4.4.1. Famille des fonctions f_φ 161
4.4.2. Polynômes de Sonine 161
4.4.3. Polynômes d'Hermite 163
4.4.4. Famille des fonctions f_μ 164

4.5. DÉTERMINATION DES COEFFICIENTS DE TRANSPORT 172
4.5.1. Les modèles M_1 et M_1^* 172
4.5.2. Le choix des développements et le calcul de λ, μ, κ pour M_1 . 173
4.5.3. La résolution des équations intégrales pour le modèle M_1 . . 175
4.5.4. Méthodes d'étude du modèle M_1^* 179

BIBLIOGRAPHIE 181

CHAPITRE 3

Dans ce chapitre, nous recherchons, par un développement du type de celui de Enskog, des solutions normales de l'équation de Boltzmann écrite précédemment. Nous limitant au premier ordre, nous sommes amenés à un ensemble d'équations intégrales de Fredholm. Puis, spécialisant notre étude aux solutions voisines de la solution localement maxwellienne nous étudions, en 3.3, les flux d'énergie et de quantité de mouvement, et nous faisons apparaître le coefficient de conductivité et les deux coefficients de viscosité, dont nous donnons les expressions en fonction des solutions des équations intégrales. Pour obtenir ces résultats nous développons, en 3.2, une technique d'intégration valable pour toute la classe des modèles moléculaires envisagés précédemment.

3.1. Recherche des solutions normales de l'équation de Boltzmann.

3.1.1. MÉTHODE. — En suivant la méthode de Chapman-Enskog [*4*], [*14*], nous introduisons un petit paramètre ε dans l'équation (2.23) que nous écrivons

$$\frac{\partial f}{\partial t} + [f, \mathrm{H}] = \frac{1}{\varepsilon}\mathscr{J}(f, f) \tag{1}$$

et nous cherchons des solutions de (1) développables en séries entières par rapport au paramètre ε. Adoptons pour f le développement :

$$f = f^{(0)}(1 + \varepsilon\varphi^{(1)} + \varepsilon^2\varphi^{(2)} + \ldots \varepsilon^n\varphi^{(n)} + \ldots)$$

et égalons dans (1) les coefficients des puissances successives de ε.

L'opérateur $\mathscr{J}(f, h)$ est bilinéaire et symétrique en ses arguments :

$$\mathscr{J}(f_1+f_2, h_1+h_2)=\mathscr{J}(f_1, h_1)+\mathscr{J}(f_1, h_2)+\mathscr{J}(f_2, h_1)+\mathscr{J}(f_2, h_2);$$
$$\mathscr{J}(f, h)=\mathscr{J}(h, f).$$

On obtient alors, en utilisant la notation $f^{(n)} = f^{(0)}\varphi^{(n)}$, la famille d'équations suivantes pour définir $f^{(0)}, \varphi^{(1)}, \ldots, \varphi^{(n)}$:

$$\mathscr{J}(f^{(0)}, f^{(0)}) = 0 \tag{2}$$

$$2\mathscr{J}(f^{(0)}, f^{(0)}\varphi^{(1)}) = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + [f^{(0)}, \mathrm{H}] \tag{3}$$

. . . . . .

$$(4) \qquad 2\mathscr{J}(f^{(0)}, f^{(0)}\varphi^{(n)}) = \frac{\partial f^{(n-1)}}{\partial t} + [f^{(n-1)}, \mathrm{H}] - \sum_{m=1}^{n-1} \mathscr{J}(f^{(m)}, {}^{(n-m)})$$

Le problème se sépare alors en plusieurs phases :

a) La première étape est la résolution de l'équation (2).

b) $f^{(0)}$ étant supposé connu, les équations (3), ..., (4) sont des équations intégrales pour les inconnues $\varphi^{(1)}, \ldots, \varphi^{(n)}$. Ces équations ont la même partie homogène $2\mathscr{J}(f^{(0)}, f^{(0)}\chi)$ et ne diffèrent que par la partie non homogène : celle-ci est définie à chaque étape à partir des dérivées partielles des solutions des équations précédentes.

3.1.2. Résolution de $\mathscr{J}(f^{(0)}, f^{(0)}) = 0$. — Dans le cas général, cette équation s'écrit :

$$(5) \qquad \frac{1}{m}\int [f^{(0)\prime} f_1^{(0)\prime} \mathrm{Y}(g) - f^{(0)} f_1^{(0)} \mathrm{Y}(-g)] d\sigma^1 d\tau^1 = 0$$

et dans les cas que nous avons définis en 2.2 elle prend l'une des formes simplifiées :

$$(6) \qquad \frac{1}{m}\int (f^{(0)\prime} f_1^{(0)\prime} - f^{(0)} f_1^{(0)}) \mathrm{Y}(g) d\sigma^1 d\tau^1 = 0$$

$$(6\ bis) \qquad \frac{1}{m}\int f^{(0)\prime} f_1^{(0)\prime} \mathrm{Y}(g) d\sigma^1 d\tau^1 - \frac{1}{m}\int f_*^{(0)} f_{1*}^{(0)} \mathrm{Y}(g^*) d\sigma^{1*} d\tau^{1*} = 0$$

Lorsque l'une de ces dernières équations est valable, les seules solutions en sont celles de l'équation du bilan détaillé :

$$(7) \qquad f^{(0)\prime} f_1^{(0)\prime} - f^{(0)} f_1^{(0)} = 0$$

(voir la démonstration du théorème H, en 2.4).

En général, les solutions de (7) ne sont pas solutions de (5). Nous n'aborderons pas ici la résolution de (5) dans le cas général et nous n'étudierons que les cas où (6) ou (6 *bis*) sont valables ; cependant, un certain nombre de résultats ultérieurs sont obtenus sans avoir recours aux hypothèses qui conduisent à (6) ou (6 *bis*).

Les solutions de (7) sont telles que :

$$(8) \qquad \log f^{(0)\prime} + \log f_1^{(0)\prime} - \log f_1^{(0)} - \log f^{(0)} = 0$$

$\log f^{(0)}$ est donc un invariant sommatoire de la collision. L'étude faite en 1.12 nous permet d'écrire $\log f^{(0)}$ comme somme d'une combinaison

linéaire des invariants sommatoires propres et d'une fonction arbitraire des invariants sommatoires dégénérés.

Comme nous l'avons déjà signalé, les invariants sommatoires de la collision ne sont pas toujours tous des invariants du mouvement de la molécule isolée. Donc, *les solutions de* (3) *ne sont pas en général, solutions de l'équation de Boltzmann*, contrairement à ce qui se passe dans le cas « monoatomique ».

Les solutions de (2) qui vérifient aussi $\dfrac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + [f^{(0)}, \mathrm{H}] = 0$ sont les distributions maxwelliennes généralisées étudiées en 2.5, que nous avons notées f^0. L'hamiltonien $\mathrm{H}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q})$ a été supposé de la forme :

$$\mathrm{H}_1(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{a}) + \Phi(\boldsymbol{a})$$

où $\mathrm{H}_1(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{a})$ est une forme quadratique définie positive par rapport à l'ensemble des variables p_i. La forme bilinéaire B associée à cette forme quadratique définit un produit scalaire sur l'espace vectoriel $\mathscr{P}$ (isomorphe à $\mathbf{R}^s$) des variables $\boldsymbol{p}$: $\langle \boldsymbol{p} \,|\, \boldsymbol{p}_1 \rangle = \mathrm{B}(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{p}_1)$. Soit $\mathscr{D}$ le sous-espace vectoriel de $\mathscr{P}$, de dimension $s - r$ engendré par les invariants sommatoires dégénérés linéaires en p_i (rappelons que tous les invariants sommatoires dégénérés sont des fonctions de $\boldsymbol{a}$ et de ces invariants linéaires). Notons $\mathscr{D}^\perp$ l'orthogonal de $\mathscr{D}$ (dimension $\mathscr{D}^\perp = r$). Nous pouvons choisir une base de $\mathscr{P}$ formée de r vecteurs de $\mathscr{D}^\perp$ (notés $e_1, \ldots, e_r$ ou globalement $\boldsymbol{e}$ et de $n - r$ vecteurs de $\mathscr{D}$ (notés $d_{r+1}, \ldots, d_n$ ou globalement $\boldsymbol{d}$). Avec ces nouvelles variables l'hamiltonien prend la forme $\mathrm{H} = \tilde{\mathrm{H}}(\boldsymbol{e}, \boldsymbol{a}) + \mathrm{H}'''(\boldsymbol{d}, \boldsymbol{a}) + \Phi(\boldsymbol{a})$, où $\tilde{\mathrm{H}}$ et H''' sont des formes quadratiques définies positives respectivement par rapport aux variables e_i et d_i. Sans restriction supplémentaire, nous pouvons encore supposer que le jacobien $\dfrac{\mathrm{D}(e_1, \ldots, e_r, d_{r+1}, \ldots, d_s)}{\mathrm{D}(p_1, \ldots, p_s)}$ a pour valeur 1. Les variables e_i et d_i sont des combinaisons linéaires des p_i, à coefficients fonctions des a_i.

Le sous-espace vectoriel de $\mathscr{P}$ engendré par tous les invariants sommatoires linéaires en p_i, contient $\mathscr{D}$. Son intersection avec $\mathscr{D}^\perp$ est un sous-espace vectoriel $\mathscr{I}$ (de dimension v). Nous pouvons encore, comme ci-dessus, choisir dans une base $b_1, \ldots, b_v$; $c_{v+1}, \ldots, c_r$, ou $(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{c})$, telle que $b_1, \ldots, b_v \in \mathscr{I}$, que $c_{v+1}, \ldots, c_r \in \mathscr{I}^\perp$ ($\mathscr{I}^\perp$ orthogonal de $\mathscr{I}$ dans $\mathscr{D}^\perp$) et que le jacobien $\mathrm{D}\dfrac{(b_1, \ldots, b_v, c_{v+1}, c_r)}{\mathrm{D}(e_1, \ldots, e_r)}$ ait pour valeur 1. L'hamiltonien s'écrit alors $\mathrm{H} = \mathrm{H}'(\boldsymbol{b}\,;\boldsymbol{a}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}\,;\boldsymbol{a}) + \mathrm{H}'''(\boldsymbol{d}\,;\boldsymbol{a}) + \Phi(\boldsymbol{a})$; $\mathrm{H}', \mathrm{H}'', \mathrm{H}'''$ sont des formes quadratiques définies positives respectivement par rapport aux variables b_i, c_i, d_i.

Puisque H, $\boldsymbol{d}$, $\boldsymbol{a}$ sont des invariants sommatoires,

$$\tilde{\mathrm{H}}(\boldsymbol{e}\,;\,\boldsymbol{a}) = \mathrm{H}'(\boldsymbol{b}\,;\,\boldsymbol{a}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}\,;\,\boldsymbol{a})$$

en est un aussi. Les résultats de 1.12 nous permettent alors d'écrire

$$\log f^{(0)} = \lambda\tilde{\mathrm{H}} + \boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{b} + \gamma(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{d}),$$

où λ et μ sont des constantes (indépendantes de $\boldsymbol{a}$ et $\boldsymbol{d}$) et γ une fonction arbitraire de $\boldsymbol{a}$ et $\boldsymbol{d}$. Les quantités $\lambda, \boldsymbol{\mu}, \gamma$ sont liées aux différents moments de la fonction $f^{(0)}$ de la façon suivante : soit $\mathrm{B}'(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\,;\,\boldsymbol{a})$ la forme bilinéaire associée à la forme quadratique $\mathrm{H}'(\boldsymbol{x}\,;\,\boldsymbol{a})$.

Définissons $\hat{\boldsymbol{b}}$, fonction de $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\mu}, \lambda$ par

$$2\frac{\partial \mathrm{B}'}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{x}, \hat{\boldsymbol{b}}) + \frac{\boldsymbol{\mu}}{\lambda} = 0,$$

ou

$$\hat{\boldsymbol{b}} = \mathbf{B}(\boldsymbol{a})\cdot\frac{\boldsymbol{\mu}}{\lambda},$$

et posons : $\mathbf{B} = \boldsymbol{b} - \hat{\boldsymbol{b}}$. Nous pouvons écrire

$$\lambda\mathrm{H}'(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{a}) + \boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{b} = \lambda(\mathrm{H}'(\mathbf{B}, \boldsymbol{a}) - \mathrm{H}'(\hat{\boldsymbol{b}}, \boldsymbol{a})),$$

d'où

$$\log f^{(0)} = \lambda\mathrm{H}'(\mathbf{B}, \boldsymbol{a}) + \lambda\mathrm{H}''(\boldsymbol{c}, \boldsymbol{a}) + \gamma'(\boldsymbol{a}, \boldsymbol{d}).$$

Nous désignerons par $\langle \mathrm{A} \rangle^{(0)*}$ la mesure « restreinte » de la fonction $\mathrm{A}(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{c}, \boldsymbol{d}, \boldsymbol{a})$ par rapport à $f^{(0)}$ définie par l'intégrale :

$$\langle \mathrm{A} \rangle^{(0)*} = \int \mathrm{A} f^{(0)} d\boldsymbol{b}d\boldsymbol{c} \tag{9}$$

et par $\langle \mathrm{A} \rangle^{(0)}$ la mesure « globale » de A par rapport à $f^{(0)}$ définie par l'intégrale :

$$\langle \mathrm{A} \rangle^{(0)} = \int \mathrm{A} f^{(0)} d\boldsymbol{b}d\boldsymbol{c}d\boldsymbol{d}d\boldsymbol{a} = \int \langle \mathrm{A} \rangle^{(0)*} d\boldsymbol{d}d\boldsymbol{a} \tag{10}$$

Compte tenu des égalités

$$\left\{\begin{array}{lll}
\displaystyle\int e^{\lambda\mathrm{H}'} d\boldsymbol{b} = \frac{\pi^{\nu/2}}{(-1)^{\nu/2}\sqrt{\det \mathrm{H}'}} & ; & \displaystyle\int e^{\lambda\mathrm{H}''} d\boldsymbol{c} = \frac{\pi^{r-\nu/2}}{(-\lambda)^{r-\nu/2}\sqrt{\det \mathrm{H}''}}\,; \\
\displaystyle\int \mathbf{B} e^{\lambda\mathrm{H}'} d\boldsymbol{b} = 0 & ; & \displaystyle\int \boldsymbol{c} e^{\lambda\mathrm{H}''} d\boldsymbol{c} = 0\,; \\
\displaystyle\int \mathrm{H}'(\mathbf{B}) e^{\lambda\mathrm{H}'} d\boldsymbol{b} = -\frac{\nu}{2\lambda}\int e^{\lambda\mathrm{H}'} d\boldsymbol{b} & ; & \displaystyle\int \mathrm{H}'' e^{\lambda\mathrm{H}''} d\boldsymbol{c} = \frac{r-\nu}{-2\lambda}\int e^{\lambda\mathrm{H}''} d\boldsymbol{c}\,;
\end{array}\right. \tag{11}$$

valables pour $\lambda < 0$, on a :

$$\begin{cases} \rho^* = \langle 1 \rangle^{(0)*} = \left(\dfrac{\pi}{-\lambda}\right)^{r/2} \dfrac{1}{\sqrt{\det \mathrm{H}' \cdot \det \mathrm{H}''}} e^{\gamma'(\boldsymbol{a},\boldsymbol{d})} ; \\ \langle \boldsymbol{b} \rangle^{(0)*} = \langle \hat{\boldsymbol{b}} \rangle^{(0)*} = \hat{\boldsymbol{b}}\rho^* = \rho^* \mathbf{B}(\boldsymbol{a}) \cdot \dfrac{\boldsymbol{\mu}}{\lambda} ; \\ \langle \boldsymbol{c} \rangle^{(0)*} = 0 \quad ; \quad \langle \mathrm{H}'(\mathbf{B}) \rangle^{(0)*} = -\dfrac{\nu}{2\lambda}\rho^* \quad ; \quad \langle \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}) \rangle^{(0)*} = -\dfrac{r-\nu}{2\lambda}\rho^* ; \end{cases}$$

Il en résulte aussitôt que :

$$(12) \qquad \begin{cases} \rho = \langle 1 \rangle^{(0)} = \left(\dfrac{\pi}{-\lambda}\right)^{r/2} \displaystyle\int \dfrac{e^{\gamma'(\boldsymbol{a},\boldsymbol{d})}}{\sqrt{\det \mathrm{H}' \det \mathrm{H}''}} d\boldsymbol{d}d\boldsymbol{a} ; \\ \langle \boldsymbol{b} \rangle^{(0)} = \left\{ \displaystyle\int \rho^* \mathbf{B}(\boldsymbol{a}) d\boldsymbol{d}d\boldsymbol{a} \right\} \cdot \dfrac{\boldsymbol{\mu}}{\lambda} ; \\ \langle \boldsymbol{c} \rangle^{(0)} = 0 \quad ; \quad \langle \mathrm{H}'(\mathbf{B}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}) \rangle^{(0)} = -\dfrac{r}{2\lambda}\rho. \end{cases}$$

Si nous définissons, de façon cohérente avec le cas monoatomique et les définitions du chapitre 2, la température T par la formule :

$$(13) \qquad \rho \frac{r}{2} k\mathrm{T} = \langle \mathrm{H}'(\mathbf{B}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}) \rangle^{(0)}$$

nous avons $-\dfrac{1}{\lambda} = k\mathrm{T}$ et $f^{(0)}$ peut alors s'écrire :

$$(14) \qquad f^{(0)} = \rho^* \frac{(\det \mathrm{H}' \cdot \det \mathrm{H}'')^{1/2}}{(\pi k\mathrm{T})^{r/2}} e^{-\frac{1}{k\mathrm{T}}(\mathrm{H}'(\boldsymbol{b}-\hat{\boldsymbol{b}})+\mathrm{H}''(\boldsymbol{c}))}$$

Dans cette formule ρ^* est une fonction de $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{d}$, $\boldsymbol{r}$, t. T est une fonction de $\boldsymbol{r}$ et t. Quant à $\hat{\boldsymbol{b}}$, sa dépendance vis-à-vis de $\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{r}$, t est donnée par :

$$(15) \qquad \hat{\boldsymbol{b}} = -\mathbf{B}(\boldsymbol{a}) \cdot k\mathrm{T}(\boldsymbol{r}, t)\boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{r}, t) = \mathbf{B}(\boldsymbol{a}) \cdot \boldsymbol{\mu}'(\boldsymbol{r}, t)$$

où les éléments B_{ij} de $\mathbf{B}$ sont des fonctions connues de $\boldsymbol{a}$, et où $\boldsymbol{\mu} = \lambda\boldsymbol{\mu}'$.

3.1.3. Calcul du second membre de (3). — Avec la forme générale de $f^{(0)}$, nous pouvons calculer

$$\Lambda f^{(0)} = \frac{\partial f^{(0)}}{\partial t} + [f^{(0)}, \mathrm{H}] = f^{(0)} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \log f^{(0)} + [\log f^{(0)}, \mathrm{H}] \right\},$$

en fonction des dérivées partielles de ρ^*, T, $\boldsymbol{\mu}'$.

Nous désignerons par $\frac{\bar{d}}{dt}$ l'opérateur $\frac{\partial}{\partial t} + \dot{\boldsymbol{x}} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}$ et par Δ la quantité $\det \mathrm{H}' \cdot \det \mathrm{H}''$.

On a :

$$\log f^{(0)} = \log \rho^* - \frac{r}{2} \log (\pi k \mathrm{T}) + \frac{1}{2} \log \Delta(\boldsymbol{a}) - \frac{1}{k\mathrm{T}} \{ \mathrm{H}'(\boldsymbol{b} - \hat{\boldsymbol{b}}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}) \}$$

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + [\ \ , \mathrm{H}] \right\} \log \rho^* = \frac{\bar{d}}{dt} \log \rho^* + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}} \log \rho^* \cdot \dot{\boldsymbol{a}} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{d}} \log \rho^* \cdot \dot{\boldsymbol{d}} \ (^1)$$

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + [\ \ , \mathrm{H}] \right\} \log \mathrm{T} = \frac{\bar{d}\mathrm{T}}{dt}$$

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + [\ \ , \mathrm{H}] \right\} \log \Delta(\boldsymbol{a}) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}} (\log \Delta) \cdot \dot{\boldsymbol{a}}$$

D'autre part, d'après (15) :

$$\mathrm{H}'(\boldsymbol{b} - \hat{\boldsymbol{b}}) = \mathrm{H}'(\boldsymbol{b}) + \boldsymbol{\mu}' \cdot \boldsymbol{b} + \mathrm{H}'(\hat{\boldsymbol{b}}) = \mathrm{H}'(\boldsymbol{b}) + \boldsymbol{\mu}' \cdot \boldsymbol{b} - \frac{1}{2} \mathbf{B}(\boldsymbol{a}) : \boldsymbol{\mu}'\boldsymbol{\mu}'$$

et donc :

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + [\ \ , \mathrm{H}] \right\} (\mathrm{H}'(\boldsymbol{b} - \hat{\boldsymbol{b}})) = [\mathrm{H}'(\boldsymbol{b}), \mathrm{H}] + \frac{\bar{d}}{dt} \boldsymbol{\mu}' \cdot \boldsymbol{b} + \boldsymbol{\mu}'[\boldsymbol{b}, \mathrm{H}]$$
$$- \left\{ \dot{\boldsymbol{a}} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}} \mathbf{B}(\boldsymbol{a}) \right\} : \boldsymbol{\mu}'\boldsymbol{\mu}' - \{ \mathbf{B}(\boldsymbol{a}) \cdot \boldsymbol{\mu}' \} \cdot \frac{\bar{d}\boldsymbol{\mu}'}{dt}$$

ou encore :

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + [\ \ , \mathrm{H}] \right\} \mathrm{H}'(\mathbf{B}) = [\mathrm{H}'(\boldsymbol{b}), \mathrm{H}] + \mathbf{B} \cdot \frac{\bar{d}}{dt} \boldsymbol{\mu}' + \boldsymbol{\mu}'[\boldsymbol{b}, \mathrm{H}] - \left\{ \dot{\boldsymbol{a}} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}} \mathbf{B}(\boldsymbol{a}) \right\} : \boldsymbol{\mu}'\boldsymbol{\mu}'$$

enfin : $[\mathrm{H}'(\boldsymbol{b}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}), \mathrm{H}] = [\mathrm{H} - \mathrm{H}'''(\boldsymbol{d}, \boldsymbol{a}) - \Phi(\boldsymbol{a}), \mathrm{H}]$, ce qui, puisque $[\mathrm{H}, \mathrm{H}] = 0$, donne :

$$[\mathrm{H}' + \mathrm{H}'', \mathrm{H}] = -2\mathrm{B}'''(\boldsymbol{d}, \dot{\boldsymbol{d}}) - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}} \{ \mathrm{H}''' + \Phi \} \cdot \dot{\boldsymbol{a}} ;$$

on a alors la formule finale :

$$(16) \quad \Lambda = \frac{\bar{d}}{dt} \log \rho^* + \frac{d}{dt} \log \mathrm{T} \left\{ -\frac{r}{2} + \frac{1}{k\mathrm{T}} (\mathrm{H}'(\mathbf{B}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c})) \right\} - \frac{1}{k\mathrm{T}} \mathbf{B} \cdot \frac{\bar{d}}{dt} \boldsymbol{\mu}'$$
$$- \frac{\boldsymbol{\mu}'}{k\mathrm{T}} \cdot [\boldsymbol{b}, \mathrm{H}] + \frac{1}{k\mathrm{T}} \left(\boldsymbol{a} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}} \mathbf{B}(\boldsymbol{a}) \right) : \boldsymbol{\mu}'\boldsymbol{\mu}' + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}} \left\{ \log \rho^* + \frac{1}{k\mathrm{T}} (\mathrm{H}'''(\boldsymbol{d}) \right.$$
$$\left. + \Phi(\boldsymbol{a})) + \frac{1}{2} \log \Delta \right\} \cdot \dot{\boldsymbol{a}} + \frac{2}{k\mathrm{T}} \mathrm{B}'''(\boldsymbol{d}, \dot{\boldsymbol{d}}) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{d}} \log \rho^* \cdot \dot{\boldsymbol{d}}$$

---

(1) La notation $\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + [\ \ , \mathrm{H}] \right\} \mathrm{U}$ est employée ici pour $\frac{\partial \mathrm{U}}{\partial t} + [\mathrm{U}, \mathrm{H}]$.

3.1.4. CAS PARTICULIER IMPORTANT. — Supposons que le seul invariant sommatoire linéaire soit la quantité de mouvement $\boldsymbol{p}_x = m\boldsymbol{v}$: c'est un invariant non dégénéré. Alors :

$$\mathscr{D} = \{0\} \quad ; \quad \mathscr{I} = \{m\boldsymbol{v}\} \quad ; \quad v = 3 \quad ; \quad r = s \quad ; \quad \boldsymbol{b} = m\boldsymbol{v} ;$$

$$\mathrm{H}'(b) = \frac{m}{2}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{p}_x\cdot\boldsymbol{p}_x}{2m} \quad ; \quad \mathrm{H}''' = 0 \quad ; \quad \hat{\boldsymbol{b}} = -\frac{\boldsymbol{\mu}}{\lambda}$$

et on le notera $m\boldsymbol{u}$; on écrira

$$\mathbf{V} = \boldsymbol{v} - \boldsymbol{u} \quad ; \quad \mathbf{B}(\boldsymbol{a}) = -\mathbf{1} \quad ; \quad \boldsymbol{c} = \boldsymbol{p}_a \quad ; \quad \det \mathrm{H}' = \frac{m^3}{8} ;$$

$$\det \mathrm{H}'' = \frac{8\Delta}{m^3} \quad ; \quad [\boldsymbol{b}, \mathrm{H}] = [\boldsymbol{p}_x, \mathrm{H}] = 0 \quad ; \quad \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}}\cdot\mathbf{B}(\boldsymbol{a}) = 0.$$

on a aussi :

$$f^{(0)} = \rho^*\left(\frac{1}{2m}\right)^{3/2} \frac{\sqrt{\det \mathrm{H}''}}{(\pi k\mathrm{T})^{s/2}}\, e^{-\frac{1}{2k\mathrm{T}}\{m\mathrm{V}^2 + 2\mathrm{H}''(\boldsymbol{p}_a)\}} \tag{17}$$

La formule (16) s'écrit alors :

$$\Lambda = \frac{\bar{d}}{dt}\log\rho^* + \frac{\bar{d}}{dt}\log \mathrm{T}\left\{-\frac{s}{2} + \frac{1}{2k\mathrm{T}}(m\mathrm{V}^2 + 2\mathrm{H}''(\boldsymbol{p}_a))\right\} + \frac{m\mathbf{V}}{k\mathrm{T}}\cdot\frac{\bar{d}\boldsymbol{u}}{dt} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}}\left\{\log\rho^* + \frac{1}{2}\log\Delta + \frac{\Phi(a)}{k\mathrm{T}}\right\}\cdot\dot{\boldsymbol{a}} \tag{18}$$

3.1.5. ÉTUDE DU PREMIER MEMBRE DE (3) ET (4). — Nous utilisons ici les formules démontrées en 2.3.2 en remplaçant f par $f^{(0)}$ et h par $f^{(0)}\varphi$. On a alors :

$$2\mathscr{J}(f^{(0)}, f^{(0)}\varphi) = \frac{1}{m}\int\{ f^{(0)\prime}f_1^{(0)\prime}(\varphi_1' + \varphi')\mathrm{Y}(g) - f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi_1 + \varphi)\mathrm{Y}(-g)\}\, d\sigma^1 d\tau^1 \tag{19}$$

Montrons que l'on peut mettre (19) sous la forme :

$$2\mathscr{J}(f^{(0)}, f^{(0)}\varphi) = -\mathscr{L}(\varphi) = -\mathrm{L}^0(\tau)\varphi - \int \mathrm{L}(\tau, \tau^2)\varphi_2 d\tau^2.$$

On a :

$$\mathscr{L}(\varphi) = \frac{\varphi}{m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}\mathrm{Y}(-g)d\sigma^1 d\tau^1 + \frac{1}{m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}\varphi_1\mathrm{Y}(-g)d\sigma^1 d\tau^1 - \frac{1}{m}\int f^{(0)\prime}f_1^{(0)\prime}\varphi'\mathrm{Y}(g)d\sigma^1 d\tau^1 - \frac{1}{m}\int f^{(0)\prime}f_1^{(0)\prime}\varphi_1'\mathrm{Y}(g)d\sigma^1 d\tau^1 \tag{20}$$

le premier terme fournit immédiatement

$$L^0(\tau) = +\frac{1}{m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}Y(-g)d\sigma^1 d\tau^1.$$

Le second terme est, sans transformation, sous la forme

$$\int L_1(\tau, \tau^2)\varphi^2 d\tau^2$$

(il suffit de faire $\tau^2 = \tau^1$) puisque $gd\sigma^1$ est une fonction de τ et τ^1.

Écrivons le troisième terme sous la forme :

$$-\frac{1}{m}\int f_2^{(0)}f_1^{(0)}\varphi'_2 Y(g_{12})\delta(\tau^2 - \tau)d\sigma^1 d\tau^1 d\tau^2 \tag{21}$$

où $\delta(\tau^2 - \tau)$ est la distribution de Dirac à plusieurs variables. Utilisons alors les égalités $g'_{12} = -g_{12}$ et $\left|\frac{D(\tau'^1, \tau'^2)}{D(\tau^1, \tau^2)}\right| = 1$ pour transformer (21) en

$$-\frac{1}{m}\int f_2^{(0)}f_1^{(0)}\varphi_2 Y(-g_{12})\delta(\tau'^2 - \tau')d\sigma d\tau^1 d\tau^2,$$

ce qui s'écrit $\int \varphi_2 L_2(\tau, \tau^2)d\tau^2$ avec

$$L_2(\tau, \tau^2) = -\frac{1}{m}\int f_2^{(0)}f_1^{(0)}Y(-g_{12})\delta(\tau'^2 - \tau')d\sigma d\tau^1.$$

On procéderait de façon analogue pour mettre le quatrième terme de (20) sous la forme $\int \varphi_2 L_3(\tau, \tau^2)d\tau^2$, avec

$$L_3(\tau, \tau^2) = -\frac{1}{m}\int f_2^{(0)}f_1^{(0)}Y(-g_{12})\delta(\tau'^1 - \tau)d\sigma d\tau^1,$$

ce qui termine la démonstration.

$\mathscr{L}(\varphi)$ est donc un opérateur de Fredholm. Afin de résoudre les équations intégrales (3) et (4), il est nécessaire de déterminer l'opérateur adjoint $\mathscr{L}^*(\varphi)$.

Définissons le produit scalaire de deux fonctions tensorielles (de même ordre) α et β de l'ensemble des variables τ par $(\alpha, \beta) = \int \alpha\cdot\beta d\tau$, où $\alpha\cdot\beta$ est un produit contracté tel que (α, β) soit un scalaire.

Alors l'opérateur adjoint $\mathscr{L}^*$ de $\mathscr{L}$ est défini par :

$$(\mathscr{L}^*(\varphi), \psi) = (\mathscr{L}(\psi), \varphi) = (\varphi, \mathscr{L}(\psi)) \tag{22}$$

pour tout φ et ψ, tenseurs de même ordre, pour lesquels le second membre de (22) est défini.

Appliquant la formule (2.35) nous pouvons écrire :

$$(\mathscr{L}(\psi), \varphi) = -2\mathscr{J}_\varphi(f^{(0)}, f^{(0)}\psi)$$
$$= -\frac{1}{2m}\int(\varphi' + \varphi'_1 - \varphi - \varphi_1)f^{(0)}f_1^{(0)}(\psi + \psi_1)\mathrm{Y}(-g)d\sigma^1 d\tau d\tau^1$$

puis

$$(\mathscr{L}(\psi), \varphi) = +\frac{1}{m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi + \varphi_1 - \varphi' - \varphi'_1)\psi\mathrm{Y}(-g)d\sigma^1 d\tau d\tau^1,$$

d'où il résulte que :

$$\mathscr{L}^*(\varphi) = \frac{1}{m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi + \varphi_1 - \varphi' - \varphi'_1)\mathrm{Y}(-g)d\sigma^1 d\tau^1. \tag{23}$$

L'équation homogène adjointe qui s'écrit

$$\mathscr{L}^*(\varphi) = 0 \tag{24}$$

admet les invariants sommatoires du choc comme solutions. Nous allons montrer maintenant que, *dans les cas que nous étudions ici*, ce sont les seules solutions de (24).

a) Lorsque les hypothèses restrictives que nous avons adoptées en 2.2 conduisent à (6), l'opérateur $\mathscr{L}(\varphi)$ s'écrit aussi :

$$\mathscr{L}(\varphi) = \frac{1}{m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi + \varphi_1 - \varphi' - \varphi'_1)\mathrm{Y}(g)d\sigma^1 d\tau^1$$

on a alors :

$$(\mathscr{L}(\varphi), \varphi) = \frac{1}{2m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi+\varphi_1)(\varphi+\varphi_1-\varphi'-\varphi'_1)\mathrm{Y}(g)d\sigma^1 d\tau d\tau^1$$
$$(\mathscr{L}^*(\varphi), \varphi) = \frac{1}{2m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi+\varphi_1)(\varphi+\varphi_1-\varphi'-\varphi'_1)\mathrm{Y}(-g)d\sigma^1 d\tau d\tau^1$$
$$= -\frac{1}{2m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi'+\varphi'_1)(\varphi+\varphi_1-\varphi'-\varphi'_1)\mathrm{Y}(g)d\sigma^1 d\tau d\tau^1$$

et, puisque :

$$(\mathscr{L}(\varphi), \varphi) = (\mathscr{L}^*(\varphi), \varphi) = \frac{1}{2}((\mathscr{L}(\varphi), \varphi) + (\mathscr{L}^*(\varphi), \varphi)),$$

$$(\mathscr{L}(\varphi), \varphi) = \frac{1}{4m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi'+\varphi'_1-\varphi-\varphi_1)^2\mathrm{Y}(g)d\sigma^1 d\tau d\tau^1 \tag{25}$$

On a $(\mathscr{L}(\varphi), \varphi) \geq 0$, l'égalité n'ayant lieu que si $\varphi' + \varphi'_1 - \varphi - \varphi_1$ est identiquement nul.

b) Pour les modèles du type $\mathfrak{M}^*$, décrits en 2.2 et qui conduisent à (6 *bis*) on peut écrire :

$$\mathscr{L}(\varphi) = -\frac{1}{m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi'_1+\varphi')\mathrm{Y}(g)d\sigma^1 d\tau^1 + \int f_*^{(0)}f_{1*}^{(0)}(\varphi_1^*+\varphi^*)\mathrm{Y}(g^*)d\sigma^{1*}d\tau^{1*}$$

et donc :

$$(26)\quad (\mathscr{L}(\varphi), \varphi) = -\frac{1}{2m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi+\varphi_1)(\varphi'_1+\varphi')\mathrm{Y}(g)d\sigma^1 d\tau d\tau^1 + \frac{1}{2m}\int f^{(0)}f^{(0)}(\varphi+\varphi_1)(\varphi_1^*+\varphi^*)\mathrm{Y}(g^*)d\sigma^1 d\tau d\tau^1$$

Si on limite (ce qui est légitime avec les hypothèses faites sur f) la classe des fonctions $\varphi(\tau)$ à celle des fonctions vérifiant l'hypothèse $\mathscr{H}^*$: $\varphi(\tau)=\varphi(\tau^*)$ pour tout τ, on peut alors, en faisant le changement $\tau^* \to \tau$, $\tau^{1*} \to \tau^1$ dans le dernier terme de (26), écrire :

$$(\mathscr{L}(\varphi), \varphi) = \frac{1}{2m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi+\varphi_1)(\varphi+\varphi_1-\varphi'-\varphi'_1)\mathrm{Y}(g)d\sigma^1 d\tau^1 d\tau.$$

Comme on a toujours :

$$(\mathscr{L}(\varphi), \varphi) = -\frac{1}{2m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi'+\varphi'_1)(\varphi+\varphi_1-\varphi'-\varphi'_1)\mathrm{Y}(g)d\sigma^1 d\tau^1 d\tau$$

on a encore $(\mathscr{L}(\varphi), \varphi) \geqslant 0$ pour toute fonction φ satisfaisant l'hypothèse $\mathscr{H}^*$, l'égalité n'ayant lieu que pour les invariants sommatoires (vérifiant $\mathscr{H}^*$).

Comme $\mathscr{L}(\varphi) = 0$ entraîne $(\mathscr{L}(\varphi), \varphi) = 0$, nous pouvons donc affirmer que, dans les cas qui nous intéressent, les seules solutions de $\mathscr{L}^*(\varphi) = 0$ (resp. les seules solutions de $\mathscr{L}^*(\varphi)$ vérifiant $\mathscr{H}^*$) sont les invariants sommatoires (resp. les invariants sommatoires vérifiant $\mathscr{H}^*$).

Remarques.

a) L'opérateur $\mathscr{L}(\varphi)$ n'est en général pas symétrique même dans les cas auxquels nous nous limitons. Cependant, lorsqu'il existe des chocs inverses, le changement de variables étudié en 1.9 permet d'écrire :

$$\mathscr{L}^*(\varphi) = \frac{1}{m}\int f^{(0)}f_1^{(0)}(\varphi+\varphi_1-\varphi'-\varphi'_1)\mathrm{Y}(g)d\sigma^1 d\tau^1 = \mathscr{L}(\varphi),$$

et donc, dans ce cas $\mathscr{L}(\varphi)$ est symétrique.

b) Dans les cas où il existe des invariants dégénérés (vérifiant éventuellement $\mathscr{H}^*$), l'équation homogène $\mathscr{L}(\varphi) = 0$ admet une infinité de solu-

tions : son noyau est donc singulier. Ce sera le cas en particulier pour les modèles à collisions instantanées, lorsque f dépendra explicitement des variables a_i.

3.1.6. DÉTERMINATION DE $\varphi^{(1)}$. — Pour résoudre la famille d'équations (3) (4) en suivant la méthode de Enskog, nous identifions tout d'abord, à l'instant t, les coefficients ρ^*, $\boldsymbol{\mu}'$, T qui apparaissent dans (16) avec les valeurs des moments correspondants de $f^{(0)}$ et, par suite, nous imposons pour $r \geqslant 1$ les conditions suivantes aux fonctions $f^{(r)}$:

$$(27) \qquad \begin{cases} \displaystyle\int f^{(r)} d\boldsymbol{b}d\boldsymbol{c} = 0 \\ \displaystyle\int \boldsymbol{b} f^{(r)} d\boldsymbol{b}d\boldsymbol{c}dd\boldsymbol{a} = 0 \\ \displaystyle\int (\mathrm{H}'(\mathbf{B}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c})) f^{(r)} d\boldsymbol{b}d\boldsymbol{c}dd\boldsymbol{a} = 0 \end{cases}$$

Les équations (3) et (4) sont solubles si leur second membre est orthogonal à chacune des solutions de l'équation adjointe $\mathscr{L}^*(\varphi) = 0$. Or, ces solutions sont les invariants sommatoires de la collision : $\boldsymbol{b}$, $\mathrm{H}'(\mathbf{B}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c})$, $\gamma(\boldsymbol{d}, \boldsymbol{a})$.

Les conditions de solubilité s'écrivent, au rang r ($r \geqslant 1$) :

$$(28) \qquad \int \frac{\partial f^{(r-1)}}{\partial t} + [f^{(r-1)}, \mathrm{H}] - \sum_{m=1}^{r-1} \mathscr{J}(f^{(m)}, f^{(r-m)}) \begin{Bmatrix} \mathrm{H}'(\mathbf{B}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}) \\ \boldsymbol{b} \\ \gamma(\boldsymbol{d}, \boldsymbol{a}) \end{Bmatrix} d\boldsymbol{b}d\boldsymbol{c}dd\boldsymbol{a} = \begin{Bmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \end{Bmatrix}$$

En appliquant l'égalité 2.35, il apparaît que

$$\int \mathscr{J}(f^{(m)}, f^{(r-m)}) \psi d\boldsymbol{b}d\boldsymbol{c}dd\boldsymbol{a}$$

est nul lorsque ψ est un invariant sommatoire.

Les conditions (28) se réduisent alors à :

$$(29) \qquad \int \left\{ \frac{\partial f^{(r)}}{\partial t} + [f^{(r)}, \mathrm{H}] \right\} \cdot \begin{Bmatrix} \mathrm{H}'(\mathbf{B}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}) \\ \boldsymbol{b} \\ \gamma(\boldsymbol{d}, \boldsymbol{a}) \end{Bmatrix} d\boldsymbol{b}d\boldsymbol{c}dd\boldsymbol{a} = \begin{Bmatrix} 0 \\ \mathbf{0} \\ 0 \end{Bmatrix}$$

pour tout $r \geqslant 0$.

La dernière de ces égalités, qui doit être vraie quelle que soit la fonction $\gamma(\boldsymbol{d}, \boldsymbol{a})$ entraîne :

$$\int \left\{ \frac{\partial f^{(r)}}{\partial t} + [f^{(r)}, \mathrm{H}] \right\} d\boldsymbol{b}d\boldsymbol{c} = 0 \tag{30}$$

Pour chaque valeur de r, les conditions de solubilité (29) et (30) peuvent s'écrire :

$$\left\{ \begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} \langle \boldsymbol{b} \rangle^{(r)} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \langle \boldsymbol{b}\dot{\boldsymbol{x}} \rangle^{(r)} - \left\langle \frac{d\boldsymbol{b}}{dt} \right\rangle^{(r)} = 0 \\ &\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathrm{H}'(\mathbf{B}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}) \rangle^{(r)} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \langle (\mathrm{H}'(\mathbf{B}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}))\dot{\boldsymbol{x}} \rangle^{(r)} \\ &\qquad\qquad - \left\langle \frac{d}{dt}(\mathrm{H}' + \mathrm{H}'') \right\rangle^{(r)} = 0 \end{aligned} \right. \tag{31}$$

et

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle 1 \rangle^{(r)*} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \langle \dot{\boldsymbol{x}} \rangle^{(r)*} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}} \cdot \langle \dot{\boldsymbol{a}} \rangle^{(r)*} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{d}} \cdot \langle \dot{\boldsymbol{d}} \rangle^{(r)*} = 0 \tag{32}$$

où l'on a noté :

$$\langle \psi \rangle^{(r)} = \int \langle \psi \rangle^{(r)*} d\boldsymbol{d}d\boldsymbol{a} = \int \psi f^{(r)} d\boldsymbol{b}d\boldsymbol{c}d\boldsymbol{d}d\boldsymbol{a}$$

Or, les équations de conservation, écrites pour la distribution f, sont :

$$\left\{ \begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial t} \langle \boldsymbol{b} \rangle + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \langle \boldsymbol{b}\dot{\boldsymbol{x}} \rangle - \left\langle \frac{\partial \boldsymbol{b}}{dt} \right\rangle = 0 \\ &\frac{\partial}{\partial t} \langle \mathrm{H}' + \mathrm{H}'' \rangle + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \langle (\mathrm{H}' + \mathrm{H}'')\dot{\boldsymbol{x}} \rangle - \left\langle \frac{d}{dt}(\mathrm{H}' + \mathrm{H}'') \right\rangle = 0 \end{aligned} \right. \tag{33}$$

et

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle 1 \rangle^{*} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \langle \dot{\boldsymbol{x}} \rangle^{*} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}} \cdot \langle \dot{\boldsymbol{a}} \rangle^{*} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{d}} \cdot \langle \dot{\boldsymbol{d}} \rangle^{*} = 0 \tag{34}$$

avec

$$\langle \psi \rangle = \sum_{r=0}^{\infty} \langle \psi \rangle^{(r)} \qquad \text{et} \qquad \langle \psi \rangle^{*} = \sum_{r=0}^{\infty} \langle \psi \rangle^{(r)*}.$$

Nous avons identifié les quantités $\boldsymbol{\mu}'$, T, ρ avec les moments correspondants de $f^{(0)}$. Comme dans le cas classique un découpage adéquat de $\frac{\partial \rho^*}{\partial t}$, $\frac{\partial \mathrm{T}}{\partial t}$, $\frac{\partial \boldsymbol{\mu}'}{\partial t}$ sous la forme :

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial t} = \sum_{r \geq 0} \frac{\partial_r \rho^*}{\partial t} \quad , \quad \frac{\partial \mathrm{T}}{\partial t} = \sum_{r \geq 0} \frac{\partial_r \mathrm{T}}{\partial t} \quad , \quad \frac{\partial \boldsymbol{\mu}'}{\partial t} = \sum_{r \geq 0} \frac{\partial_r \boldsymbol{\mu}'}{\partial t},$$

permet de faire en sorte que les équations (31) et (32) soient vérifiées.

Nous ne nous intéresserons ici qu'à la détermination de $\varphi^{(1)}$, c'est-à-dire de $f^{(1)}$. Alors, les conditions de compatibilité se réduisent, pour $r = 0$, aux équations de conservation avec la distribution $f^{(0)}$ c'est-à-dire à un système de relations algébriques entre les dérivées partielles de ρ^*, T, $\boldsymbol{\mu}'$ par rapport à $\boldsymbol{x}$ et t, les dérivées partielles de ρ^* par rapport à $\boldsymbol{a}$ et $\boldsymbol{d}$ et les dérivées partielles des différents flux qui interviennent. Ces flux, qui sont calculés par rapport à la distribution $f^{(0)}$, s'expriment en fonction des moments de $f^{(0)}$, c'est-à-dire de ρ^*, T, $\boldsymbol{\mu}'$. On obtient donc un ensemble de relations algébriques entre les dérivées partielles du premier ordre des fonctions ρ^*, T, $\boldsymbol{\mu}'$. Ces équations sont linéaires et résolubles par rapport aux dérivées en t.

En remplaçant $\dfrac{\partial\rho^*}{\partial t}, \dfrac{\partial \mathrm{T}}{\partial t}, \dfrac{\partial\boldsymbol{\mu}'}{\partial t}$ dans (16) par les valeurs tirées de ces équations, on obtient pour $\varphi^{(1)}$ une équation intégrale résoluble. Le second membre Λ est une fonction de

$$\rho^*, \mathrm{T}, \boldsymbol{\mu}', \frac{\partial\rho^*}{\partial\boldsymbol{x}}, \frac{\partial\rho^*}{\partial\boldsymbol{a}}, \frac{\partial\rho^*}{\partial\boldsymbol{d}}, \frac{\partial \mathrm{T}}{\partial\boldsymbol{x}}, \frac{\partial\boldsymbol{\mu}'}{\partial\boldsymbol{x}}, \boldsymbol{a}, \boldsymbol{d}.$$

Dans le cas général, la réalisation effective des calculs décrits ci-dessus soulève des difficultés d'écriture considérables, dues essentiellement à ce que certains invariants sommatoires propres, en particulier $\dot{\boldsymbol{x}}$, n'appartiennent pas toujours au sous-espace vectoriel $\mathscr{I}$ et qu'il est donc nécessaire de les décomposer sur la base $(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{d})$.

Aussi nous n'effectuerons le calcul que dans le cas restrictif qui a conduit à la forme (18) pour Λ : *le seul invariant linéaire en* p_i *est* $\dot{\boldsymbol{x}} = \dfrac{\boldsymbol{p}_x}{m}$ *qui sera noté* $\boldsymbol{v}$.

Dans ce cas, $\dot{\boldsymbol{a}}$ est une combinaison linéaire des $\boldsymbol{p}_a$ (notés $\boldsymbol{c}$ dans le cas général). Comme $\langle \boldsymbol{c} \rangle^{(0)*} = 0$, on a : $\langle \dot{\boldsymbol{a}} \rangle^{(0)*} = 0$. On a aussi :

$$\langle \dot{\boldsymbol{x}}\dot{\boldsymbol{x}} \rangle^{(0)} = \langle \mathbf{VV} \rangle^{(0)} + \langle \boldsymbol{uu} \rangle^{(0)} = \rho\boldsymbol{uu} + \rho\frac{k\mathrm{T}}{m}\mathbf{1}$$

et

$$\mathrm{H}'(\boldsymbol{b}) = \frac{m\mathrm{V}^2}{2} + \frac{mu^2}{2} + m\boldsymbol{u}\cdot\mathbf{V},$$

ce qui entraîne :

$$\langle \mathrm{H}'(\boldsymbol{b}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}) \rangle^{(0)} = \frac{m}{2}\langle \mathrm{V}^2 \rangle^{(0)} + \frac{m}{2}\rho u^2 + \langle \mathrm{H}''(\boldsymbol{p}_a) \rangle^{(0)} = \frac{m\rho u^2}{2} + \frac{sk\mathrm{T}}{2}$$

et

$$\langle (\mathrm{H}'(\boldsymbol{b}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c}))\dot{\boldsymbol{x}} \rangle^{(0)} = \left(\frac{m\rho u^2}{2} + \frac{sk\mathrm{T}}{2}\right)\rho\boldsymbol{u} + m\langle (\boldsymbol{u}\cdot\mathbf{V})\mathbf{V} \rangle^{(0)}$$

$$= \left(\frac{m\rho u^2}{2} + \frac{sk\mathrm{T}}{1}\right)\rho\boldsymbol{u} + \rho k\mathrm{T}\boldsymbol{u}$$

enfin :

$$\left\langle \frac{d}{dt}(\mathrm{H}'(\boldsymbol{b}) + \mathrm{H}''(\boldsymbol{c})) \right\rangle^{(0)} = \left\langle \frac{d}{dt}(\mathrm{H} - \Phi(\boldsymbol{a})) \right\rangle^{(0)} = \left\langle -\frac{\partial \Phi}{\partial \boldsymbol{a}} \cdot \dot{\boldsymbol{a}} \right\rangle^{(0)} = 0$$

Compte tenu de ces résultats, les équations (33) et (34) s'écrivent :

$$\frac{\partial \rho^*}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot (\rho^* \boldsymbol{u}) = 0 \tag{35}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \boldsymbol{u}) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot (\rho \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\left(\rho \frac{k\mathrm{T}}{m}\right) = 0 \tag{36}$$

$$\frac{sk}{2}\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathrm{T}) + \frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{m\rho}{2} u^2\right) + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \left(\frac{m\rho u^2}{2} + \frac{sk}{2}\rho \mathrm{T} + \rho k \mathrm{T}\right)\boldsymbol{u} = 0 \tag{37}$$

(35) entraîne aussi, par intégration sur $\boldsymbol{a}$,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot (\rho \boldsymbol{u}) = 0 \tag{38}$$

Utilisant (38) dans (36), puis (38) et (39) dans (37) il vient :

$$\rho\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\right)\boldsymbol{u} + \frac{k\mathrm{T}}{m}\frac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{x}} + \rho \frac{k\mathrm{T}}{m}\frac{\partial \log \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}} = 0 \tag{39}$$

et

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \boldsymbol{u} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\right)\mathrm{T} + \frac{2}{s}\mathrm{T}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{u} = 0 \tag{40}$$

Faisant alors apparaître l'opérateur $\frac{\bar{d}}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \dot{\boldsymbol{x}} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}$, on peut écrire :

$$\frac{\bar{d} \log \rho^*}{dt} = \mathbf{V} \cdot \frac{\partial \log \rho^*}{\partial \boldsymbol{x}} - \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{u} \tag{41}$$

$$\frac{\bar{d}\boldsymbol{u}}{dt} = \left(\mathbf{V} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\right)\boldsymbol{u} - \frac{k\mathrm{T}}{m}\frac{\partial \log \rho}{\partial \boldsymbol{x}} - \frac{k\mathrm{T}}{m}\frac{\partial \log \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{42}$$

$$\frac{\bar{d} \log \mathrm{T}}{dt} = \mathbf{V} \cdot \frac{\partial \log \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}} - \frac{2}{s}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{u} \tag{43}$$

$$\frac{\bar{d}}{dt} \log \frac{\rho^*}{\rho} = \mathbf{V} \cdot \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \log \frac{\rho^*}{\rho} \tag{44}$$

En reportant les valeurs de $\frac{\bar{d}}{dt}\left(\log\frac{\rho^*}{\rho}\right)$, $\frac{\bar{d}}{dt}\log T$, $\frac{\bar{d}}{dt}\boldsymbol{u}$ dans (18) on obtient :

$$(45)\quad \Lambda = -\mathbf{V}\cdot\frac{\partial \log T}{\partial \boldsymbol{x}}\left(\frac{s}{2}+1-\frac{m\mathrm{V}^2+2\mathrm{H}''}{2k\mathrm{T}}\right)+\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}}:\frac{m}{k\mathrm{T}}\mathbf{VV}$$
$$-\frac{m\mathrm{V}^2+2\mathrm{H}''}{sk\mathrm{T}}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{u}+\mathbf{V}\cdot\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\left(\log\frac{\rho^*}{\rho}\right)+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}}\left(\log\frac{\rho^*}{\rho}+\frac{1}{2}\log\Delta+\frac{\Phi(a)}{k\mathrm{T}}\right)\cdot\dot{\boldsymbol{a}}$$

Faisons apparaître le déviateur $\mathbf{V}^0\mathbf{V} = \mathbf{VV} - \frac{\mathrm{V}^2}{3}\mathbf{1}$, nous obtenons alors :

$$(46)\quad \Lambda = -\mathbf{V}\cdot\frac{\partial \log T}{\partial \boldsymbol{x}}\left(\frac{s}{2}+1-\frac{m\mathrm{V}^2+2\mathrm{H}''}{2k\mathrm{T}}\right)$$
$$+\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}}:\left\{\frac{m}{k\mathrm{T}}\mathbf{V}^0\mathbf{V}+\left(\frac{m\mathrm{V}^2}{k\mathrm{T}}\left(\frac{1}{3}-\frac{1}{s}\right)-\frac{2\mathrm{H}''}{sk\mathrm{T}}\right)\mathbf{1}\right\}+\mathbf{V}\cdot\frac{\partial \log\frac{\rho^*}{\rho}}{\partial \boldsymbol{x}}$$
$$+\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}}\left(\log\frac{\rho^*}{\rho}+\frac{1}{2}\log\Delta+\frac{\Phi(a)}{k\mathrm{T}}\right)\cdot\dot{\boldsymbol{a}}$$

Définissons :

$$\mathbf{W}=\left(\frac{m}{2k\mathrm{T}}\right)^{1/2}\mathbf{V}\ ;\ \mathbf{R}=\left(\frac{1}{k\mathrm{T}}\right)^{1/2}\boldsymbol{p}_a\ ;\ \varepsilon^t=\frac{m\mathrm{V}^2}{2k\mathrm{T}}=\mathbf{W}^2\ ;\ \varepsilon^i=\frac{\mathrm{H}''(p_a)}{k\mathrm{T}}=\mathrm{H}''(\mathbf{R}).$$

On a alors, avec ces notations :

$$(47)\qquad f^{(0)} = \rho^*\frac{\Delta}{\sqrt{8m^3}}\frac{1}{(\pi k\mathrm{T})^{s/2}}e^{-\varepsilon^t-\varepsilon^i}$$

$$(48)\quad \Lambda = -\left(\frac{2k\mathrm{T}}{m}\right)^{1/2}\frac{\partial \log T}{\partial \boldsymbol{x}}\cdot\mathbf{W}\left(\frac{s}{2}+1-\varepsilon^t-\varepsilon^i\right)+\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}}:\left\{2\mathbf{W}^0\mathbf{W}\right.$$
$$\left.+\left(\frac{2(s-3)}{3s}\varepsilon^t-\frac{2}{s}\varepsilon^i\right)\mathbf{1}\right\}+\left(\frac{2k\mathrm{T}}{m}\right)^{1/2}\frac{\rho}{\rho^*}\mathbf{W}\cdot\frac{\partial\left(\frac{\rho^*}{\rho}\right)}{\partial \boldsymbol{x}}+\dot{\boldsymbol{a}}\cdot\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{a}}\left(\log\frac{\rho^*\sqrt{\Delta}e^{\frac{\Phi(a)}{k\mathrm{T}}}}{\rho}\right)$$

$$(49)\qquad \delta = \frac{\mathrm{D}(\boldsymbol{p}_x, \boldsymbol{p}_a)}{\mathrm{D}(\mathbf{W}, \mathbf{R})} = (2m)^{3/2}(k\mathrm{T})^{s/2}$$

et, pour une fonction $\theta(\boldsymbol{p}_x, \boldsymbol{p}_a)$, notée aussi $\Theta(\mathbf{W}, \mathbf{R})$:

$$(50)\quad \langle\,\theta(\mathbf{V}, \boldsymbol{p}_a)\,\rangle^{(0)} = \int f^{(0)}\theta d\boldsymbol{p}_x d\boldsymbol{p}_a d\boldsymbol{a} = \int \rho^*\frac{\sqrt{\Delta''}}{\pi^{s/2}}e^{-\varepsilon^t-\varepsilon^i}\Theta(\mathbf{W}, \mathbf{R})d\boldsymbol{a}d\mathbf{W}d\mathbf{R}$$

Écrivons Λ sous la forme :

$$(51)\qquad \Lambda=\left(\frac{2k\mathrm{T}}{m}\right)^{1/2}\frac{\partial \log \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}}\cdot\mathbf{K}^{(1)}+\frac{\partial u}{\partial \boldsymbol{x}}:(\mathbf{K}^{(2)}+\mathbf{1}\mathrm{K}^{(3)})+\left(\frac{2k\mathrm{T}}{m}\right)^{1/2}\mathrm{K}^{(4)}+\mathrm{K}^{(5)}$$

où :

$\mathbf{K}^{(1)}$ est le vecteur $\mathbf{W}\left(-\left(\frac{s}{2}+1\right)+\varepsilon^t+\varepsilon^i\right)$,

$\mathbf{K}^{(2)}$ le tenseur symétrique à trace nulle $2\mathbf{W}^0\mathbf{W}$,

$\mathrm{K}^{(3)}$ le scalaire $2\frac{s-3}{3s}\varepsilon^t-\frac{2}{s}\varepsilon^i=\frac{2}{3}\varepsilon^t-\frac{2}{s}(\varepsilon^t+\varepsilon^i)$,

$\mathrm{K}^{(4)}$ le scalaire $\frac{\rho}{\rho^*}\mathbf{W}\cdot\frac{\partial\left(\frac{\rho^*}{\rho}\right)}{\partial \boldsymbol{x}}$,

$\mathrm{K}^{(5)}=\sum_i \mathrm{K}^{(5i)}$ le scalaire $\sum_i \dot{a}_i\frac{\partial}{\partial a_i}\left(\log\frac{\rho^*}{\rho}\sqrt{\Delta''}e^{\frac{\Phi(a)}{k\mathrm{T}}}\right)$.

Chacune des quantités $\mathbf{K}^{(1)}$, $\mathbf{K}^{(2)}$, $\mathrm{K}^{(3)}$, $\mathrm{K}^{(4)}$, $\mathrm{K}^{(5)}$ vérifie les conditions d'orthogonalité

$$(52)\qquad \int \mathrm{K}^{(i)}f^{(0)}d\boldsymbol{p}_x d\boldsymbol{p}_a=0$$

$$(53)\qquad \int \mathrm{K}^{(i)}\cdot\begin{Bmatrix}\mathbf{W}\\ \varepsilon^t+\varepsilon^i\end{Bmatrix}f^{(0)}d\boldsymbol{a}d\boldsymbol{p}_x d\boldsymbol{p}_a=\begin{Bmatrix}0\\0\end{Bmatrix}$$

En effet :

a) $\mathbf{K}^{(1)}$ est impair en $\mathbf{W}$. La seule vérification à faire est :

$$\int \mathrm{W}^2e^{-\varepsilon^t-\varepsilon^i}\left(\frac{s}{2}+1-\varepsilon^t-\varepsilon^i\right)d\mathbf{W}d\mathbf{R}=0,$$

ce qui résulte de

$$\int \mathrm{W}^4e^{-\mathrm{W}^2}d\mathbf{W}=\frac{5}{2}\int \mathrm{W}^2e^{-\mathrm{W}^2}d\mathbf{W}\qquad\text{et de}\qquad \int \varepsilon^ie^{-\varepsilon^i}d\mathbf{R}=\frac{s-3}{2}\int e^{-\varepsilon^i}d\mathbf{R}$$

b) On a :

$$\int \mathbf{W}^0\mathbf{W}e^{-\mathrm{W}^2}f(\mathrm{W}^2)d\mathbf{W}=\int \mathbf{W}^0\mathbf{W}\cdot\mathbf{W}e^{-\mathrm{W}^2}d\mathbf{W}=0,$$

ce qui démontre les conditions d'orthogonalité pour $\mathbf{K}^{(2)}$.

c) On a :

$$\int \varepsilon^te^{-(\varepsilon^t+\varepsilon^i)}d\mathbf{W}d\mathbf{R}=\frac{3}{2}\int e^{-(\varepsilon^t+\varepsilon^i)}d\mathbf{W}d\mathbf{R}$$

et

$$\int \varepsilon^i e^{-(\varepsilon^t+\varepsilon^i)} d\mathbf{W} d\mathbf{R} = \frac{s-3}{2} \int e^{-(\varepsilon^t+\varepsilon^i)} d\mathbf{W} d\mathbf{R},$$

ce qui démontre (52) pour $K^{(3)}$.

D'autre part,

$$\begin{cases} \displaystyle\int (\varepsilon^t)^2 e^{-(\varepsilon^t+\varepsilon^i)} d\mathbf{W} d\mathbf{R} = \frac{15}{4} \int e^{-(\varepsilon^t+\varepsilon^i)} d\mathbf{W} d\mathbf{R} \\ \displaystyle\int \varepsilon^t \varepsilon^i e^{-(\varepsilon^t+\varepsilon^i)} d\mathbf{W} d\mathbf{R} = \frac{3(s-3)}{4} \int e^{-(\varepsilon^t+\varepsilon^i)} d\mathbf{W} d\mathbf{R} \\ \displaystyle\int (\varepsilon^i)^2 e^{-(\varepsilon^t+\varepsilon^i)} d\mathbf{W} d\mathbf{R} = \frac{(s-3)(s-1)}{4} \int e^{-(\varepsilon^t+\varepsilon^i)} d\mathbf{W} d\mathbf{R} \end{cases}$$

d'où :

$$\int (\varepsilon^t + \varepsilon^i)\left(2\frac{s-3}{3s}\varepsilon^t - \frac{2}{s}\varepsilon^i\right) e^{-(\varepsilon^t+\varepsilon^i)} d\mathbf{W} d\mathbf{R} = 0,$$

ce qui démontre (43) pour $K^{(3)}$.

d) $K^{(4)}$ est impair en $\mathbf{W}$. Il suffit donc de vérifier :

$$\int \frac{\rho}{\rho^*} \mathbf{W}\mathbf{W} \cdot \frac{\partial\left(\dfrac{\rho^*}{\rho}\right)}{\partial \boldsymbol{x}} \rho \sqrt{\Delta''} e^{-(\varepsilon^t+\varepsilon^i)} d\mathbf{W} d\mathbf{R} d\boldsymbol{a} = 0$$

Cela résulte de ce que $\int \mathbf{W}\mathbf{W} e^{-\varepsilon^t} d\mathbf{W}$ et $\int \sqrt{\Delta''} e^{-\varepsilon^i} d\mathbf{R}$ sont indépendants de $\boldsymbol{a}$, et de

$$\int \rho \frac{\partial\left(\dfrac{\rho^*}{\rho}\right)}{\partial \boldsymbol{x}} d\boldsymbol{a} = \rho \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \int \frac{\rho^*}{\rho} d\boldsymbol{a} = 0.$$

e) a_i est linéaire et homogène en R_i, ce qui démontre (52) et (53) pour chacun des termes de la somme dont est constitué $K^{(5)}$.

On pourra donc écrire, puisque $\dfrac{\partial \log T}{\partial \boldsymbol{x}}$ et $\dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}}$ sont indépendants de $\mathbf{W}$, $\mathbf{R}$, $\boldsymbol{a}$:

$$(54) \quad \varphi = -\left(\frac{2kT}{m}\right)^{1/2} \mathbf{A} \cdot \frac{\partial \log T}{\partial \boldsymbol{x}} - \mathbf{b} : \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}} - \left(\frac{2kT}{m}\right)^{1/2} D - \sum_i E^{(i)} + \alpha(\varepsilon^t + \varepsilon^i) + \boldsymbol{\beta} \cdot \mathbf{W} + \gamma(\boldsymbol{a})$$

où **A**, **b**, D, $E^{(i)}$ sont respectivement solutions des équations intégrales résolubles :

$$(55)\qquad \begin{cases} -2\mathcal{J}(f^{(0)}, f^{(0)}\mathbf{A}) = \mathrm{I}(\mathbf{A}) = f^{(0)}\mathbf{K}^{(1)} \\ -2\mathcal{J}(f^{(0)}, f^{(0)}\mathbf{b}) = \mathrm{I}(\mathbf{b}) = f^{(0)}(\mathbf{K}^{(2)} + \mathrm{K}^{(3)}\mathbf{1}) \\ -2\mathcal{J}(f^{(0)}, f^{(0)}\mathrm{D}) = \mathrm{I}(\mathrm{D}) = f^{(0)}\mathrm{K}^{(4)} \\ -2\mathcal{J}(f^{(0)}, f^{(0)}\mathrm{E}^{(i)}) = \mathrm{I}(\mathrm{E}^{(i)}) = f^{(0)}\mathrm{K}^{(5i)} \end{cases}$$

où α, $\boldsymbol{\beta}$ sont des quantités indépendantes de $\boldsymbol{a}$, **W**, **R** et γ une fonction de $\boldsymbol{a}$, indépendante de **W** et **R**.

L'opérateur I conserve les propriétés tensorielles des fonctions sur lesquelles il opère : on peut donc décomposer le tenseur **b** en somme d'un tenseur symétrique à trace nulle **B**, d'un tenseur diagonal C**1** et d'un tenseur antisymétrique **C**′, vérifiant respectivement les équations :

$$(56)\qquad \mathrm{I}(\mathbf{B}) = f^{(0)}\mathrm{K}^{(2)} \quad ; \quad \mathrm{I}(\mathrm{C}) = f^{(0)}\mathrm{K}^{(3)} \quad ; \quad \mathrm{I}(\mathbf{C}') = 0.$$

Les solutions de (56-3) sont les invariants sommatoires. Or, aucune combinaison de ces invariants sommatoires ne peut constituer un tenseur antisymétrique d'ordre 2. Donc $\mathbf{C}' = 0$,

La solution $f^{(1)} = f^{(0)}\varphi$ doit vérifier les conditions (27) qui s'écrivent ici :

$$(57)\qquad \int f^{(0)}\varphi d\mathbf{W}d\mathbf{R} = 0\,; \int f^{(0)}\varphi\mathbf{W}d\mathbf{W}d\mathbf{R}d\boldsymbol{a} = 0\,; \int f^{(0)}\varphi(\varepsilon^t + \varepsilon^i)d\mathbf{W}d\mathbf{R}d\boldsymbol{a} = 0.$$

Or, pour chacune des équations vérifiée par **A**, **B**, C, D, $E^{(i)}$ on obtient une solution unique si l'on impose les conditions d'orthogonalité suivantes :

$$(58)\qquad \int f^{(0)}\xi^{(j)}d\mathbf{W}d\mathbf{R} = 0 \quad ; \quad \int f^{(0)}\begin{Bmatrix} \mathbf{W} \\ \varepsilon^t + \varepsilon^i \end{Bmatrix}\xi^{(j)}d\mathbf{W}d\mathbf{R}d\boldsymbol{a} = 0\,;$$

où $\xi^{(j)} = \mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathrm{C}, \mathrm{D}, \mathrm{E}^{(i)}$.

Si l'on fait α, $\boldsymbol{\beta}$, γ nuls dans (54) et si l'on choisit pour **A**, **B**, C, D, $E^{(i)}$ les solutions qui vérifient (58), les conditions (57) seront satisfaites et φ sera déterminé de manière unique.

3.1.7. Restriction du problème. — Les formules établies jusqu'à présent l'ont été en supposant que $f^{(0)}$ est une solution arbitraire de (2). Rappelons ici que, contrairement à ce qui se passe dans le cas classique, l'équation (2) admet en général, outre la solution localement maxwellienne, d'autres solutions. Cependant, la solution maxwellienne, étudiée en 2.5 est privilégiée, puisqu'elle correspond à un équilibre thermodynamique. Il est donc intéressant d'étudier les solutions de (1) voisines de cette distri-

bution localement maxwellienne. C'est ce que nous allons faire dans la suite.

Nous remplacerons donc, dans les équations finales du numéro précédent, ρ^* par sa valeur maxwellienne, donnée par l'équation (2.51)

$$\rho^* = \rho(\Delta'')^{-1/2} \frac{e^{-\Phi(a)/kT}}{\int (\Delta'')^{-1/2} e^{-\Phi(a)/kT} da},$$

($\Delta'' = \det H'' = \det A_{ij}$ dans les notations du chapitre 2).

$f^{(0)}$ est alors remplacée par f^0 dont l'expression est :

$$f^0 = \frac{\rho}{\sqrt{8m^3}} \frac{\chi(T)}{(\pi k T)^{s/2}} e^{-\varepsilon^t - \varepsilon^i - \frac{\Phi(a)}{kT}}$$

avec $\chi(T)$ donné par l'expression (2.62).

En reportant l'expression de $\frac{\rho^*}{\rho}$ dans l'expression (51) de Λ, nous constatons que les quantités $K^{(5i)}$ sont identiquement nulles, puisque

$$\frac{\rho^*}{\rho} \sqrt{\Delta''} e^{\Phi(a)/kT}$$

est indépendant de $\boldsymbol{a}$. De plus $\frac{\rho^*}{\rho}$ ne dépend de $\boldsymbol{x}$ que par l'intermédiaire de T, d'où :

$$\frac{\rho}{\rho^*} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \left(\frac{\rho^*}{\rho}\right) = \left(\frac{\partial}{\partial T}\left(-\frac{\Phi(a)}{kT} + \log \chi(T)\right)\right) \frac{\partial T}{\partial \boldsymbol{x}} = U(\boldsymbol{a}, T) \frac{\partial \log T}{\partial \boldsymbol{x}}$$

Il en résulte que :

$$K^{(4)} = U(\boldsymbol{a}, T)\mathbf{W} \cdot \frac{\partial \log T}{\partial \boldsymbol{x}}.$$

on pourra alors écrire :

$$D = \mathbf{D} \cdot \frac{\partial \log T}{\partial \boldsymbol{x}}, \tag{59}$$

$\mathbf{D}$ étant solution de :

$$I(\mathbf{D}) = f^0 U(\boldsymbol{a}, T)\mathbf{W} \tag{60}$$

La perturbation φ prend la forme :

$$\varphi = -\left(\frac{2kT}{m}\right)^{1/2} (\mathbf{A} + \mathbf{D}) \cdot \frac{\partial \log T}{\partial \boldsymbol{x}} - \mathbf{b} : \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{61}$$

Remarquons encore que dans le cas où le potentiel intramoléculaire $\Phi(\boldsymbol{a})$ est nul (molécules rigides par exemple), $U(\boldsymbol{a}, T)$ est nul et $\mathbf{D}$ est solution de : $I(\mathbf{D}) = 0$. Comme nous l'avons déjà remarqué, ceci entraîne que $\mathbf{D}$ est alors nul.

Il est important de remarquer aussi que l'ordre des opérations que nous avons effectuées n'est pas indifférent. Nous avons remplacé ρ^* par sa valeur maxwellienne dans Λ *après* avoir éliminé les dérivées partielles par rapport au temps grâce aux équations (41), (42) et (43). Ces équations relient les dérivées partielles des valeurs caractéristiques de la distribution perturbée f. Nous pouvons identifier, à un instant t donné, les valeurs de ρ^*, $\boldsymbol{u}$, T, $\dfrac{\partial \rho}{\partial \boldsymbol{x}}$, $\dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}}$; $\dfrac{\partial T}{\partial \boldsymbol{x}}$ calculées pour f aux valeurs correspondantes calculées pour f^0, mais l'identification supplémentaire de $\dfrac{\partial \rho^*}{\partial t}$ à la valeur correspondante calculée pour f^0 serait contradictoire. La procédure adoptée est donc la seule légitime.

3.2. Technique de l'intégration.

Nous allons être amenés à calculer des intégrales de la forme :

$$\Xi = \int \delta \mathbf{T}^{(p)} f^0 d\mathbf{W} d\mathbf{R} d\boldsymbol{a} \tag{62}$$

avec

$$\delta = (2m)^{3/2}(kT)^{s/2},$$

où $\mathbf{T}^{(p)}$ est un tenseur d'ordre p dont les composantes dépendent de $\mathbf{W}$, $\mathbf{R}$, $\boldsymbol{a}$ et f^0 la fonction de $\mathbf{W}$, $\mathbf{R}$, $\boldsymbol{a}$ définie par (47). Les variables W_i et R_i décrivent toutes l'intervalle $]-\infty, +\infty[$; le domaine de variation des a_i est tel que toutes les déformations et orientations de la molécule soient obtenues.

Introduisons maintenant un repère « lié » à la molécule : nous désignons par $\mathscr{T}$ le repère qui est à chaque instant centré en G, centre d'inertie de la molécule, et principal d'inertie pour la molécule. Les moments d'inertie principaux seront désignés par Γ_1, Γ_2, Γ_3 : ils peuvent varier en raison des déformations de la molécule. Les trois premiers paramètres a_i seront ceux qui définissent l'orientation du repère $\mathscr{T}$ par rapport au repère fixe $\mathscr{T}_0$. Les autres serviront à définir la « forme » de la molécule dans $\mathscr{T}$. Lors d'un déplacement sans déformation de la molécule, seuls les paramètres a_1, a_2, a_3 varieront. En d'autres termes, les paramètres a_4, a_5, ..., pourront être considérés comme des scalaires, invariants par le groupe des rotations

de $\mathbf{R}^3$. Soit $\boldsymbol{\omega}$ le vecteur rotation de $\mathscr{T}$ par rapport à $\mathscr{T}_0$ dont les composantes dans $\mathscr{T}$ et $\mathscr{T}_0$ seront notées ω_i et ω_i^0. Définissons alors le vecteur $\boldsymbol{\Omega}$ par ses composantes Ω_i dans $\mathscr{T}$:

$$\Omega_i = \left(\frac{\Gamma_i}{2k\mathrm{T}}\right)^{1/2} \omega_i \quad , \quad i = 1, 2, 3 \tag{63}$$

Les hypothèses faites sur les types de molécules étudiés nous permettent d'écrire l'énergie cinétique sous la forme

$$\frac{1}{2}[m\mathbf{V}\cdot\mathbf{V} + \boldsymbol{\omega}\cdot\mathbf{I}\cdot\boldsymbol{\omega} + 2\mathrm{T}_{\mathscr{T}}(a_4, a_5, \ldots ; \dot{a}_4, \ldots)],$$

où $\mathbf{I}$ désigne le tenseur d'inertie en G. De plus, le potentiel intra-moléculaire Φ ne dépend évidemment que des paramètres a_i ($i \geqslant 4$). Les paramètres R_i ($i \geq 4$) définis par

$$\mathrm{R}_i = \left(\frac{1}{k\mathrm{T}}\right)^{1/2} p_{a_i} = \left(\frac{1}{k\mathrm{T}}\right)^{1/2} \frac{\partial \mathrm{H}}{\partial \dot{a}_i} \quad ; \quad i \geqslant 4,$$

ne dépendent pas des paramètres a_1, a_2, a_3. Ils sont invariants par les rotations de $\mathbf{R}^3$. Nous désignerons dans la suite par $\boldsymbol{v}$ l'ensemble des variables a_i ($i \geqslant 4$), par $\bar{\boldsymbol{v}}$ l'ensemble des variables R_i ($i \geqslant 4$), et par $d\boldsymbol{v}d\bar{\boldsymbol{v}}$ l'élément différentiel $da_4, \ldots, da_s, d\mathrm{R}_4, \ldots, d\mathrm{R}_s$.

Si l'on repère $\mathscr{T}$ par rapport à $\mathscr{T}_0$ par la position d'un vecteur unitaire $\boldsymbol{k}$ de $\mathscr{T}$ et la valeur d'un angle φ de rotation autour de $\boldsymbol{k}$, un calcul simple de Jacobien montre que :

$$\left|\frac{\mathrm{D}(a_1, a_2, a_3, \mathrm{R}_1, \mathrm{R}_2, \mathrm{R}_3)}{\mathrm{D}(\boldsymbol{k}, \varphi, \Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)}\right| = \left(\frac{1}{k\mathrm{T}}\right)^{3/2} \left|\frac{\mathrm{D}(a_1, a_2, a_3, p_{a_1}, p_{a_2}, p_{a_3})}{\mathrm{D}(\boldsymbol{k}, \varphi, \Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)}\right|$$
$$= \sqrt{8\Gamma_1\Gamma_2\Gamma_3} = \sqrt{8 \det \mathbf{I}}.$$

On peut donc écrire (62) sous la forme :

$$\Xi = \int \delta\mathbf{T}^{(p)} f^{(0)} \sqrt{8 \det \mathbf{I}}\, d\mathbf{W} d\boldsymbol{\Omega} d\boldsymbol{k} d\varphi d\boldsymbol{v} d\bar{\boldsymbol{v}}. \tag{64}$$

Pour les besoins ultérieurs, il est opportun de remplacer les 8 variables d'intégrations symbolisées par $d\mathbf{W}d\boldsymbol{\Omega}d\boldsymbol{k}$ par d'autres, que nous définissons maintenant. Désignons par $\boldsymbol{i}$ le vecteur unitaire porté par $\mathbf{W}$, tel que si $\mathrm{W} = |\mathbf{W}|$, $\mathbf{W} = \mathrm{W}\boldsymbol{i}$, par $\boldsymbol{j}$ un vecteur unitaire du support de $\boldsymbol{\Omega}$, tel que le trièdre $\boldsymbol{ijk}$ soit direct, par Ω la valeur *algébrique* de $\boldsymbol{\Omega}$: $\boldsymbol{\Omega} = \Omega\boldsymbol{j}$, et posons :

$$\mu_1 = \boldsymbol{i}\cdot\boldsymbol{j} = \frac{\mathbf{W}\cdot\boldsymbol{\Omega}}{\mathrm{W}\Omega} \quad , \quad \mu_2 = \boldsymbol{i}\cdot\boldsymbol{k} = \frac{\mathbf{W}\cdot\boldsymbol{k}}{\mathrm{W}} \quad , \quad \mu_3 = \boldsymbol{jk} = \frac{\boldsymbol{\Omega}\cdot\boldsymbol{k}}{\Omega}.$$

Le trièdre $\boldsymbol{ijk}$ est repéré par rapport à $\mathscr{T}_0$ par 3 angles d'Euler α, β, γ (Par exemple, α et β peuvent être les 2 angles qui repèrent $\boldsymbol{i}$ (ou $\boldsymbol{k}$) par rapport à $\mathscr{T}_0$: le choix exact dépendra des circonstances).

Le jacobien $\dfrac{D(\mathbf{W}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{k})}{D(\mu_1, \mu_2, \mu_3, \mathbf{W}, \Omega, \alpha, \beta, \gamma)}$ a pour valeur absolue

$$\frac{\mathbf{W}^2\Omega^2 \sin \beta}{\sqrt{1 - \mu_1^2 - \mu_2^2 - \mu_3^2 + 2\mu_1\mu_2\mu_3}}$$

On posera dans la suite :

$$\mathrm{N}_\mu = (1 - \mu_1^2 - \mu_2^2 - \mu_3^2 + 2\mu_1\mu_2\mu_3)^{-1/2} \tag{65}$$

L'intégrale peut alors s'écrire, avec ces nouvelles variables :

$$\int \delta\mathbf{T}^{(p)} f^0 \sqrt{8 \det \mathbf{I}}\,\mathrm{N}_\mu \sin \beta\Omega^2\mathbf{W}^2 d\mathbf{W} d\Omega d\boldsymbol{\mu} d\varphi d\alpha d\beta d\gamma d\boldsymbol{v} d\bar{\boldsymbol{v}} \text{ (}^1\text{)} \tag{66}$$

le domaine d'intégration est défini par :

$$\begin{cases} \mathbf{W} \in [0, +\infty[\quad ; \quad \Omega \in]-\infty, +\infty[; \\ \mu_1, \mu_2, \mu_3 \in [-1, +1] \quad \text{avec} \quad 1 - \mu_1^2 - \mu_2^2 - \mu_3^2 + 2\mu_1\mu_2\mu_3 \geqslant 0 ; \\ \varphi, \alpha, \gamma \in [0, 2\pi] \quad ; \quad \beta \in [0, \pi] \quad ; \quad \bar{v}_i \in]-\infty, +\infty[\quad \text{pour tout } i ; \end{cases} \tag{67}$$

le domaine de variation des variables v_i dépend du modèle moléculaire choisi.

Dans (66) $\mathbf{T}$ et $f^{(0)}$ doivent être exprimés en fonction des nouvelles variables.

Posons : $\mathbf{X}_1 = \boldsymbol{i}$, $\mathbf{X}_2 = \boldsymbol{j}$, $\mathbf{X}_3 = \boldsymbol{k}$.

L'ensemble des tenseurs $\mathbf{X}_{i_1}\mathbf{X}_{i_2}, \ldots, \mathbf{X}_{i_p}$ où les indices $i_1, \ldots, i_p$ prennent les valeurs 1, 2, 3, forme une base des tenseurs d'ordre p. On peut donc écrire

$$\mathbf{T}^{(p)} = \sum_{i_1,\ldots,i_p} \mathrm{T}_{i_1,\ldots,i_p}(\mathbf{X}_{i_1}\mathbf{X}_{i_2}, \ldots, \mathbf{X}_{i_p})$$

où les T sont des scalaires. Puisque $\mathbf{T}$ dépend de $\mathbf{W}$, $\mathbf{R}$, $\boldsymbol{a}$, les coefficients $\mathrm{T}_{i_1,\ldots,i_p}$ dépendront des paramètres W, Ω, μ_1, μ_2, μ_3, φ, $\boldsymbol{v}$, $\bar{\boldsymbol{v}}$, qui sont invariants par le groupe des rotations de $\mathbf{R}^3$; ils ne dépendront pas des variables α, β, γ qui déterminent l'orientation du repère $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$. Avec les

(1) On écrira $d\boldsymbol{\mu}$ pour $d\mu_1 d\mu_2 d\mu_3$.

nouvelles variables utilisées, on a $\varepsilon^i = \Omega^2 + \varepsilon^v$, où ε^v est fonction uniquement de $\boldsymbol{v}$ et $\bar{\boldsymbol{v}}$. D'où, en remplaçant dans (64) f^0 par sa valeur :

$$(68)\quad \Xi = \frac{1}{\pi^{s/2}} \times \sum_{i_1,\ldots,i_p} \int \rho N_\mu \chi(T)\sqrt{8 \det \mathbf{I}e}^{-W^2-\Omega^2-\varepsilon^v-\frac{\Phi(v)}{kT}} W^2\Omega^2 T_{i_1,\ldots,i_p} dW d\Omega d\mu d\varphi dv d\bar{\boldsymbol{v}} \times \int \mathbf{X}_{i_1}\mathbf{X}_{i_2}, \ldots, \mathbf{X}_{i_p} \sin\beta d\alpha d\beta d\gamma \quad (i_1, \ldots, i_p = 1, 2, 3)$$

avec

$$\chi(T) = \frac{1}{8\pi^2 \int \frac{\sqrt{8 \det \mathbf{I}}}{\sqrt{\det \varepsilon^v}} e^{-\frac{\Phi(v)}{kT}} d\boldsymbol{v}},$$

où det ε^v est le déterminant de la forme quadratique $\varepsilon^v(\bar{\boldsymbol{v}})$.

Le premier problème est maintenant de calculer le tenseur :

$$(69)\qquad \int \mathbf{X}_{i_1}\mathbf{X}_{i_2}, \ldots, \mathbf{X}_{i_p} \sin\beta d\alpha d\beta d\gamma$$

Dans la pratique nous rencontrerons des tenseurs d'ordre au plus 4. Nous choisissons tout d'abord dans $\mathscr{T}$ une base orthonormée $\boldsymbol{e}, \boldsymbol{f}, \boldsymbol{g}$ sur laquelle nous décomposerons $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$. Nous pouvons considérer α et β comme les angles qui repèrent $\boldsymbol{e}$ par rapport au repère fixe $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$ de $\mathscr{T}_0$, et γ comme l'angle qui repère $\boldsymbol{f}$ et $\boldsymbol{g}$ autour de $\boldsymbol{e}$.

Les différentes intégrales à calculer se déduiront simplement des intégrales

$$\mathbf{M}_{pq} = \int \mathbf{L}_{pq} \sin\beta d\alpha d\beta d\gamma$$

où les tenseurs $\mathbf{L}_{pq}$ intéressants sont :

$$\begin{array}{llll}
\mathbf{L}_{11} = \boldsymbol{e} & & & \\
\mathbf{L}_{21} = \boldsymbol{ee} & \mathbf{L}_{22} = \boldsymbol{ef} & & \\
\mathbf{L}_{31} = \boldsymbol{eee} & \mathbf{L}_{32} = \boldsymbol{eef} & \mathbf{L}_{33} = \boldsymbol{efg} & \\
\mathbf{L}_{41} = \boldsymbol{eeee} & \mathbf{L}_{42} = \boldsymbol{eeef} & \mathbf{L}_{43} = \boldsymbol{eeff} & \mathbf{L}_{44} = \boldsymbol{eefg}
\end{array}$$

On a immédiatement

$$\int \boldsymbol{e} \sin\beta d\alpha d\beta = \int \boldsymbol{eee} \sin\beta d\alpha d\beta = 0.$$

De même

$$\int \boldsymbol{f} d\gamma = 0.$$

Nous désignerons dans la suite par $(U)^{t_{r,s}}$ le tenseur déduit du tenseur U par transposition sur les indices de rang r et s, et par $d\omega$ l'élément différentiel sin $\beta d\alpha d\beta d\gamma$.

Avec cette notation, les seuls tenseurs $\mathbf{M}_{pq}$ non nuls ont les valeurs suivantes :

$$\mathbf{M}_{21} = \int \boldsymbol{ee}d\omega = \frac{8\pi^2}{3}(\varepsilon_1\varepsilon_2 + \varepsilon_2\varepsilon_2 + \varepsilon_3\varepsilon_3) = \frac{8\pi^2}{3}\mathbf{1}$$

$$\mathbf{M}_{33} = \int \boldsymbol{efg}d\omega = \frac{4\pi^2}{3}\mathbf{E}\ (^1)$$

$$\mathbf{M}_{41} = \int \boldsymbol{eeee}d\omega = \frac{8\pi^2}{15}(\mathbf{11} + (\mathbf{11})^{t_{1,3}} + (\mathbf{11})^{t_{1,4}})$$

$$\mathbf{M}_{43} = \int \boldsymbol{eeff}d\omega = \frac{16\pi^2}{15}\left(\mathbf{11} - \frac{1}{4}(\mathbf{11})^{t_{1,3}} - \frac{1}{4}(\mathbf{11})^{t_{1,4}}\right)$$

En passant maintenant au calcul de (69), nous pouvons choisir le repère orthonormé $\boldsymbol{e}, \boldsymbol{f}, \boldsymbol{g}$ de façon que

$$\boldsymbol{e} = \boldsymbol{i} \quad ; \quad \boldsymbol{f} = \frac{\boldsymbol{j} - \mu_1\boldsymbol{i}}{\sqrt{1 - \mu_1^2}}.$$

Les résultats pour $p = 2$ et 4 sont donnés par les formules suivantes :

$$(70)\quad \begin{cases} a) & \displaystyle\int \boldsymbol{ii}d\omega = \mathbf{M}_{21} = \frac{8\pi^2}{3}\mathbf{1} \\ b) & \displaystyle\int \boldsymbol{ij}d\omega = \mu_1\mathbf{M}_{21} = \mu_1\frac{8\pi^2}{3}\mathbf{1} \\ c) & \displaystyle\int \boldsymbol{iiii}d\omega = \mathbf{M}_{41} = \frac{8\pi^2}{15}(\mathbf{11} + (\mathbf{11})^{t_{1,3}} + (\mathbf{11})^{t_{1,4}}) \\ d) & \displaystyle\int \boldsymbol{iiij}d\omega = \mu_1\mathbf{M}_{41} = \mu_1\frac{8\pi^2}{15}(\mathbf{11} + (\mathbf{11})^{t_{1,3}} + (\mathbf{11})^{t_{1,4}}) \\ e) & \displaystyle\int \boldsymbol{iijj}d\omega = \mu_1^2\mathbf{M}_{41} + (1 - \mu_1^2)\mathbf{M}_{42} = \frac{8\pi^2}{15}\Big((2 - \mu_1^2)\mathbf{11} \\ & \qquad\qquad + \frac{1}{2}(3\mu_1^2 - 1)((\mathbf{11})^{t_{1,3}} + (\mathbf{11})^{t_{1,4}})\Big) \\ f) & \displaystyle\int \boldsymbol{iijk}d\omega = \mu_1\mu_2\mathbf{M}_{41} + (\mu_3 - \mu_1\mu_2)\mathbf{M}_{43} = \frac{8\pi^2}{15}\Big((2\mu_3 - \mu_1\mu_2)\mathbf{11} \\ & \qquad\qquad + \frac{1}{2}(3\mu_1\mu_2 - \mu_3)((\mathbf{11})^{t_{1,3}} + (\mathbf{11})^{t_{1,4}})\Big) \end{cases}$$

(1) **E** désigne le tenseur complètement antisymétrique du troisième ordre, dont tous les éléments non nuls ont pour module 1.

Les formules (70) *c*), *d*), *e*) sont des cas particuliers de (70 *f*) où l'on fait respectivement :

c) $\mu_1=\mu_2=\mu_3=1$; *d*) $\mu_2=1$; $\mu_1=\mu_3$; *e*) $\mu_3=1$; $\mu_1=\mu_2$.

Des formules précédentes et de la définition :

$$x^0y = \frac{1}{2}(xy + yx) - \frac{1}{3}(x\cdot y)\mathbf{1}$$

on déduit

$$\int i^0 i d\omega = 0 \quad ; \quad \int i^0 j d\omega = 0$$

et

$$\int ii(j^0k)d\omega = \frac{8\pi^2}{15}\left(-\frac{1}{3}\mathbf{11} + \frac{1}{2}(\mathbf{11})^{t_{1,3}} + \frac{1}{2}(\mathbf{11})^{t_{1,4}}\right)(3\mu_1\mu_2 - \mu_3)$$

Il résulte de cette dernière formule que, si **t** est un tenseur du second ordre, indépendant de α, β, γ, on a

$$\int ii(j^0k):\mathbf{t}d\omega = (3\mu_1\mu_2 - \mu_3)\frac{8\pi^2}{15}\left(\frac{\mathbf{t}+\mathbf{t}^t}{2} - \frac{1}{3}(\text{trace } \mathbf{t})\mathbf{1}\right) = (3\mu_1\mu_2 - \mu_3)\frac{8\pi^2}{15}\overset{\circ}{\overline{\mathbf{t}}},$$

ce qui définit $\overset{\circ}{\overline{\mathbf{t}}}$, ou plus généralement :

$$\int ii(\alpha^0\beta):\mathbf{t}d\omega = (3(\alpha\cdot i)(\beta\cdot i) - \alpha\cdot\beta)\frac{8\pi^2}{15}\overset{\circ}{\overline{\mathbf{t}}} \tag{71}$$

avec α, $\beta = i, j$ ou k.

Reprenons alors la formule (68) : si p est impair, Ξ est nul. Pour $p = 2$, on a :

$$\begin{aligned}\Xi = \frac{\mathbf{1}}{\pi^{s/2}}\int \rho\chi(\mathrm{T})\mathrm{N}_\mu\sqrt{8\det \mathbf{I}}\,\mathrm{W}^2\Omega^2 e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\varepsilon^\nu-\frac{\Phi(\nu)}{k\mathrm{T}}} \\ \times \frac{8\pi^2}{3}(\mathrm{T}_{11} + \mathrm{T}_{22} + \mathrm{T}_{33} + (\mathrm{T}_{12} + \mathrm{T}_{21})\mu_1 + (\mathrm{T}_{13} + \mathrm{T}_{31})\mu_2 \\ + (\mathrm{T}_{23} + \mathrm{T}_{32})\mu_3)d\Omega d\mathrm{W}d\boldsymbol{\mu}d\varphi d\nu d\bar{\nu}\end{aligned} \tag{72}$$

Le résultat de l'intégration est donc un tenseur proportionnel au tenseur unité du second ordre.

3.3. Étude du tenseur des pressions et du vecteur flux d'énergie.

3.3.1. Définitions. — Nous avons défini le tenseur des pressions **p** et le vecteur flux d'énergie q par les égalités :

$$\mathbf{p} = \int \mathbf{V}\mathbf{V} f dp_x dp_a da \quad \text{et} \quad \mathrm{q} = \frac{1}{m}\int \mathbf{V} f\left(\frac{m\mathrm{V}^2}{2} + \mathrm{H}''\right)dp_x dp_a da.$$

Si nous remplaçons dans ces deux formules f par son développement

$$f = f^{(0)} + f^{(1)} + \ldots,$$

nous obtiendrons les développements correspondants

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}^{(0)} + \mathbf{p}^{(1)} + \ldots \quad , \quad \mathrm{q} = \mathrm{q}^{(0)} + \mathrm{q}^{(1)} + \ldots,$$

avec

$$\mathbf{p}^{(i)} = \int \mathbf{V}\mathbf{V} f^{(i)} dp_x dp_a da \quad ; \quad \mathrm{q}^{(i)} = \frac{1}{m} \int \mathbf{V} f^{(i)} \left(\frac{1}{2} m \mathrm{V}^2 + \mathrm{H}''\right) dp_x dp_a da$$

3.3.2. Calcul de $\mathbf{p}^{(0)}$ et $\mathrm{q}^{(0)}$. — En prenant le premier terme du développement de q et en utilisant les résultats obtenus en 3.2, il vient :

$$\mathrm{q}^{(0)} = \frac{1}{m} \int \mathbf{V} f^0 \left(\frac{m\mathrm{V}^2}{2} + \mathrm{H}''\right) dp_x dp_a da = \left(\frac{2k^3\mathrm{T}^3}{m^3}\right)^{1/2} \delta \int \mathbf{W}(\varepsilon^t + \varepsilon^i) f^0 d\mathbf{W} d\mathbf{R} da$$

d'où $\mathrm{q}^{(0)} = 0$.

De même, en appliquant (72) et (70.a) à $\mathbf{p}^{(0)}$ il vient :

$$\begin{aligned}
\mathbf{p}^{(0)} &= \frac{2k\mathrm{T}}{m} \int \delta \mathbf{W}\mathbf{W} f^0 d\mathbf{W} d\mathbf{R} da \\
&= \frac{2k\mathrm{T}}{m} \cdot \frac{8\pi^2}{3} \cdot \frac{1}{\pi^{s/2}} \cdot \mathbf{1} \cdot \int_0^\infty e^{-\mathrm{W}^2} \mathrm{W}^4 d\mathrm{W} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\Omega^2} \Omega^2 d\Omega \cdot \int_0^{2\pi} d\varphi \cdot \int \mathrm{N}_\mu d\boldsymbol{\mu} \\
&\qquad \cdot \int \rho \chi(\mathrm{T}) \sqrt{8 \det \mathbf{I}}\, e^{-\varepsilon^v - \frac{\Phi(v)}{k\mathrm{T}}} d\boldsymbol{v} d\bar{\boldsymbol{v}} \\
&= \frac{16k\mathrm{T}}{3m\pi^{s/2-2}} \cdot \frac{1}{2} \Gamma\left(\frac{5}{2}\right) \cdot \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \cdot 2\pi \cdot \pi^{\frac{s-6}{2}} \cdot \int \rho \chi(\mathrm{T}) \frac{\sqrt{8 \det \mathbf{I}}}{\sqrt{\det \varepsilon^v}} e^{-\frac{\Phi(v)}{k\mathrm{T}}} d\boldsymbol{v} \cdot 8\pi
\end{aligned}$$

Or, de la définition de $\chi(\mathrm{T})$, il résulte que

$$\chi(\mathrm{T}) \int \frac{\sqrt{8 \det \mathbf{I}}}{\sqrt{\det \varepsilon^v}} e^{-\frac{\Phi(v)}{k\mathrm{T}}} d\boldsymbol{v} = \frac{1}{8\pi^2}.$$

On a donc

$$\mathbf{p}^{(0)} = \rho \frac{k\mathrm{T}}{m} \mathbf{1},$$

ce qui est un résultat établi précédemment.

3.3.3. Calcul de $\mathrm{q}^{(1)}$ et $\mathbf{p}^{(1)}$. — Ces deux quantités sont définies par :

$$\mathbf{p}^{(1)} = \int \mathbf{V}\mathbf{V} f^{(1)} dp_x dp_a da = \frac{2k\mathrm{T}}{m} \delta \int \mathbf{W}\mathbf{W} f^0 \varphi d\mathbf{W} d\mathbf{R} da \tag{73}$$

et :

$$(74)\quad \mathrm{q}^{(1)} = \frac{1}{m}\int \mathbf{V} f^{(1)}\left(\frac{m\mathrm{V}^2}{2} + \mathrm{H}''\right) d\boldsymbol{p}_x d\boldsymbol{p}_a d\boldsymbol{a}$$
$$= \left(\frac{2k^3\mathrm{T}^3}{m^3}\right)^{1/2} \delta \int \mathbf{W}(\varepsilon^t + \varepsilon^i) f^0 \varphi d\mathbf{W} d\mathbf{R} d\boldsymbol{a}$$

Remplaçons, dans ces deux égalités, φ par son expression (61). D'après les résultats de 3.3, après intégration sur les variables α, β, γ, seul subsiste dans $\mathrm{q}^{(1)}$ le terme provenant de l'intégration de

$$-\frac{2k\mathrm{T}^{1/2}}{m}(\mathbf{A} + \mathbf{D})\cdot \frac{\partial \log \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}}.$$

Décomposons $\mathbf{A}$ et $\mathbf{D}$ sur $\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{k}$ en posant

$$\mathbf{A} = \mathrm{A}_1\boldsymbol{i} + \mathrm{A}_2\boldsymbol{j} + \mathrm{A}_3\boldsymbol{k} \quad , \quad \mathbf{D} = \mathrm{D}_1\boldsymbol{i} + \mathrm{D}_2\boldsymbol{j} + \mathrm{D}_3\boldsymbol{k}.$$

L'expression de $\mathrm{q}^{(1)}$ est alors, d'après (72) :

$$(75)\quad \mathrm{q}^{(1)} = -\frac{2k^2\mathrm{T}^2}{m^2}$$
$$\cdot \frac{8\pi^2}{3\pi^{s/2}}\left\{ \int \rho\chi(\mathrm{T})\mathrm{N}_\mu \sqrt{8 \det \mathbf{I}}\, \mathrm{W}^3\Omega^2(\mathrm{W}^2 + \Omega^2 + \varepsilon^\nu) e^{-\mathrm{W}^2 - \Omega^2 - \varepsilon^\nu - \frac{\Phi(\nu)}{k\mathrm{T}}}\right.$$
$$\left.\times[(\mathrm{A}_1 + \mathrm{D}_1) + (\mathrm{A}_2 + \mathrm{D}_2)\mu_1 + (\mathrm{A}_3 + \mathrm{D}_3)\mu_3] \times d\mathrm{W} d\Omega d\varphi d\boldsymbol{\mu} d\boldsymbol{v} d\bar{\boldsymbol{v}}\right\} \cdot \frac{\partial \log \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}}$$

Posons :

$$\mathrm{q}^{(1)} = -\lambda \frac{\partial \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}}.$$

La valeur du coefficient λ est :

$$(76)\quad \lambda = \frac{16k^2\mathrm{T}}{3m^2\pi^{s/2-2}} \int \rho\chi(\mathrm{T})\mathrm{N}_\mu \sqrt{8 \det \mathbf{I}}\, \mathrm{W}^3\Omega^2(\mathrm{W}^2 + \Omega^2 + \varepsilon^\nu) e^{-\mathrm{W}^2 - \Omega^2 - \varepsilon^\nu - \frac{\Phi(\nu)}{k\mathrm{T}}}$$
$$\times((\mathrm{A}_1 + \mathrm{D}_1) + (\mathrm{A}_2 + \mathrm{D}_2)\mu_1 + (\mathrm{A}_3 + \mathrm{D}_3)\mu_2) \cdot d\mathrm{W} d\Omega d\varphi d\boldsymbol{\mu} d\boldsymbol{v} d\bar{\boldsymbol{v}}$$

Tenons compte de la condition d'intégrabilité (58.a) avec $\xi^i = \mathbf{A} + \mathbf{D}$:

$$\delta \int \mathbf{W}(\mathbf{A} + \mathbf{D}) f^0 d\mathbf{W} d\mathbf{R} d\boldsymbol{a} = 0$$

En multipliant cette égalité par $-\frac{2k^2\mathrm{T}^2}{m^2}\left(\frac{s}{2} + 1\right)\frac{\partial \log \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}}$ et en ajoutant à (74) il vient :

$$\mathrm{q}^{(1)} = -\frac{2k^2\mathrm{T}^2}{m^2} \int \delta f^0 \mathbf{W}(\mathbf{A} + \mathbf{D})\left(\varepsilon^t + \varepsilon^i - \frac{s}{2} - 1\right) d\mathbf{W} d\mathbf{R} d\boldsymbol{a} \cdot \frac{\partial \log \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}}$$

ou, en revenant à la définition de $\mathbf{K}^{(1)}$:

$$\mathrm{q}^{(1)} = -\frac{2k^2\mathrm{T}^2}{m^2}\int \delta f^0 \mathbf{K}^{(1)}(\mathbf{A}+\mathbf{D})d\mathbf{W}d\mathbf{R}d\boldsymbol{a}\cdot\frac{\partial \log \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}}$$
$$= -\frac{2k^2\mathrm{T}^2}{m}\int \mathrm{I}(\mathbf{A})(\mathbf{A}+\mathbf{D})d\boldsymbol{p}_x d\boldsymbol{p}_a d\boldsymbol{a}\cdot\frac{\partial \log \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}}$$

Par comparaison avec (75) il ressort que le tenseur du second ordre

$$\int \mathrm{I}(\mathbf{A})(\mathbf{A}+\mathbf{D})d\boldsymbol{p}_x d\boldsymbol{p}_a d\boldsymbol{a}$$

est un multiple du tenseur unité.

Le coefficient de multiplicité étant égal au tiers de sa trace, on peut écrire :

$$\mathrm{q}^{(1)} = -\frac{2k^2\mathrm{T}}{3m}\left(\int \mathrm{I}(\mathbf{A})\cdot(\mathbf{A}+\mathbf{D})d\boldsymbol{p}_x d\boldsymbol{p}_a d\boldsymbol{a}\right)\frac{\partial \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}}$$

Posons, comme il est d'usage, $\mathbf{R}_p$ et $\mathbf{S}_p$ étant deux tenseurs d'ordre p :

$$[\mathbf{R}_p, \mathbf{S}_p] = (\mathbf{R}_p, \mathrm{I}(\mathbf{S}_p)) = \frac{1}{m}\int \mathbf{R}_p{}^{(p)}\mathrm{I}(\mathbf{S}_p)d\boldsymbol{p}_x d\boldsymbol{p}_a d\boldsymbol{a}\ (^1)$$

Alors :

$$\lambda = \frac{2k^2\mathrm{T}}{3m}\{[\mathbf{A}, \mathbf{A}] + [\mathbf{D}, \mathbf{A}]\} \tag{77}$$

Notons au passage que les conditions d'intégrabilité (58), s'écrivent explicitement :

$$\int \mathrm{N}_\mu \sqrt{\det \mathbf{I}e}^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\varepsilon^\nu-\frac{\Phi(\nu)}{k\mathrm{T}}}\mathrm{W}^3\Omega^2 \begin{Bmatrix} \mathrm{A}_1 + \mathrm{A}_2\mu_1 \\ \mathrm{D}_1 + \mathrm{D}_2\mu_1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} + \mathrm{A}_3\mu_2 \\ + \mathrm{D}_3\mu_2 \end{Bmatrix} d\mathrm{W}d\Omega d\varphi d\mu d\nu d\boldsymbol{v} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \tag{78}$$

Pour le calcul de $\mathbf{p}^{(1)}$ nous avons à évaluer les deux tenseurs du second ordre :

$$\boldsymbol{\pi}_1 = -\frac{2k\mathrm{T}}{m}\delta\int f^0(\mathbf{WWB}) : \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}}d\mathbf{W}d\mathbf{R}d\boldsymbol{a} \tag{79}$$

$$\boldsymbol{\pi}_2 = -\frac{2k\mathrm{T}}{m}\delta\int f^0\mathbf{WWC}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{u}\right)d\mathbf{W}d\mathbf{R}d\boldsymbol{a} \tag{80}$$

---

(1) Il ne peut y avoir confusion entre la notation [,] utilisée ici et les crochets de Poisson utilisés précédemment. Le symbole $^{(p)}$ désigne le produit p fois contracté.

puisque le terme en $\dfrac{\partial \log T}{\partial \boldsymbol{x}}$ donne une contribution nulle dans l'intégration par rapport à α, β, γ.

Calculons d'abord $\boldsymbol{\pi}_1$: $\mathbf{B}$ est un tenseur symétrique à trace nulle. L'espace vectoriel des tenseurs symétriques du second ordre à trace nulle est de dimension 5. Pour des raisons de symétrie nous allons décomposer $\mathbf{B}$ sur les six tenseurs $\boldsymbol{i}^0\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{j}^0\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{k}^0\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{i}^0\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{j}^0\boldsymbol{k}$, $\boldsymbol{k}^0\boldsymbol{i}$, qui sont reliés par la relation :

$$(81)\quad (1-\mu_3^2)\boldsymbol{i}^0\boldsymbol{i} + (1-\mu_2^2)\boldsymbol{j}^0\boldsymbol{j} + (1-\mu_1^2)\boldsymbol{k}^0\boldsymbol{k} + 2(\mu_2\mu_3-\mu_1)\boldsymbol{i}^0\boldsymbol{j} + 2(\mu_1\mu_2-\mu_3)\boldsymbol{j}^0\boldsymbol{k} + 2(\mu_1\mu_3-\mu_2)\boldsymbol{k}^0\boldsymbol{i} = 0$$

soit :

$$\mathbf{B} = \mathrm{B}_1\boldsymbol{i}^0\boldsymbol{i} + \mathrm{B}_2\boldsymbol{j}^0\boldsymbol{j} + \mathrm{B}_3\boldsymbol{k}^0\boldsymbol{k} + \mathrm{B}_4\boldsymbol{i}^0\boldsymbol{j} + \mathrm{B}_5\boldsymbol{j}^0\boldsymbol{k} + \mathrm{B}_6\boldsymbol{k}^0\boldsymbol{i}$$

Les composantes $\mathrm{B}_1, \ldots, \mathrm{B}_6$ de $\mathbf{B}$ ne sont pas définies de manière unique : si $\{\mathrm{B}_i\}$ et $\{\mathrm{B}'_i\}$ sont deux ensembles de 6 composantes d'un même tenseur $\mathbf{B}$, on a les relations :

$$(82)\quad \begin{cases} \mathrm{B}'_1 = \mathrm{B}_1 + k(1-\mu_3^2) \\ \mathrm{B}'_2 = \mathrm{B}_2 + k(1-\mu_2^2) \\ \mathrm{B}'_3 = \mathrm{B}_3 + k(1-\mu_1^2) \end{cases} \qquad \begin{cases} \mathrm{B}'_4 = \mathrm{B}_4 + 2k(\mu_2\mu_3-\mu_1) \\ \mathrm{B}'_5 = \mathrm{B}_5 + 2k(\mu_1\mu_2-\mu_3) \\ \mathrm{B}'_6 = \mathrm{B}_6 + 2k(\mu_1\mu_3-\mu_2) \end{cases}$$

où k est un réel quelconque.

Dans (79) intégrons par rapport à α, β, γ, en appliquant la formule (71) avec $\mathbf{t} = \dfrac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}}$. Il vient :

$$\int (\boldsymbol{ii}\mathbf{B}) : \frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}} d\omega = \frac{8\pi^2}{15}[2\mathrm{B}_1 + (3\mu_1^2-1)\mathrm{B}_2 + (3\mu_2^2-1)\mathrm{B}_3 + 2\mu_1\mathrm{B}_4 + (3\mu_1\mu_2-\mu_3)\mathrm{B}_5 + 2\mu_2\mathrm{B}_6]\frac{\overset{\circ}{\overline{\overline{\partial \boldsymbol{u}}}}}{\partial \boldsymbol{x}}$$

Nous pouvons alors écrire :

$$(83)\qquad \boldsymbol{\pi}_1 = -2\mu\frac{\overset{\circ}{\overline{\overline{\partial \boldsymbol{u}}}}}{\partial \boldsymbol{x}}$$

où le coefficient μ a la valeur :

$$(84)\quad \mu = \frac{8kT}{15m\pi^{s/2-2}}\int \rho\chi(T)\mathrm{N}_\mu\sqrt{8\det \mathbf{I}}\, e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\varepsilon^\nu-\frac{\Phi(\nu)}{kT}}\{2\mathrm{B}_1 + \ldots + 2\mu_2\mathrm{B}_6\Omega^2\mathrm{W}^4\} \times d\mathrm{W}d\Omega d\varphi d\mu dv d\bar{v}.$$

Si le calcul de (84) était effectué en remplaçant $\mathrm{B}_1, \ldots, \mathrm{B}_6$ par des composantes $\mathrm{B}'_1, \ldots, \mathrm{B}'_6$ de $\mathbf{B}$ liées aux précédentes par les relations (82), le résultat serait le même ; en effet, le coefficient de k est alors :

$$2(1-\mu_3^2) + (3\mu_1^2-1)(1-\mu_2^2) + (3\mu_2^2-1)(1-\mu_1^2) + 4\mu_1(\mu_2\mu_3-\mu_1) + 2(3\mu_1\mu_2-\mu_3) + 4\mu_2(\mu_1\mu_3-\mu_2)$$

quantité qui est identiquement nulle.

D'après (56) on a $\mathrm{I}(\mathbf{B}) = 2f^0\mathbf{W}^0\mathbf{W}$. On a aussi

$$\int (\dot{\boldsymbol{i}}^0\boldsymbol{i})(\boldsymbol{\alpha}^0\boldsymbol{\beta})d\omega = \int \boldsymbol{i}\boldsymbol{i}(\boldsymbol{\alpha}^0\boldsymbol{\beta})d\omega,$$

donc

$$\boldsymbol{\pi}_1 = -\frac{2k\mathrm{T}}{m}\left(\int \delta f^0(\mathbf{W}^0\mathbf{W})\mathbf{B}d\mathbf{W}d\mathbf{R}d\boldsymbol{a}\right):\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}} = -\frac{k\mathrm{T}}{m}\left(\int \delta\mathrm{I}(\mathbf{B})\mathbf{B}d\mathbf{W}d\mathbf{R}d\boldsymbol{a}\right):\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}}$$

En comparant avec (83) par exemple, on voit que le tenseur du quatrième ordre $\int \delta\mathrm{I}(\mathbf{B})\mathbf{B}d\mathbf{W}d\mathbf{R}d\boldsymbol{a}$ est proportionnel au tenseur

$$\mathbf{S} = \left(-\frac{1}{3}\mathbf{1}\mathbf{1} + \frac{1}{2}(\mathbf{1}\mathbf{1})^{t_{1,3}} + \frac{1}{2}(\mathbf{1}\mathbf{1})^{t_{1,4}}\right).$$

Le coefficient de proportionnalité est obtenu de façon simple en comparant les scalaires

$$\int \delta\mathrm{I}(\mathbf{B}):\mathbf{B}d\mathbf{W}d\mathbf{R}d\boldsymbol{a} \qquad \text{et} \qquad \mathrm{S} = \sum_{p,q} \mathrm{S}_{pqpq}$$

On trouve $\mathrm{S} = 5$. D'où

$$\boldsymbol{\pi}_1 = -\left\{\frac{k\mathrm{T}}{5m}\int \delta\mathrm{I}(\mathbf{B}):\mathbf{B}d\mathbf{W}d\mathbf{R}d\boldsymbol{a}\right\}\overset{\circ}{\overline{\overline{\frac{\partial \boldsymbol{u}}{\partial \boldsymbol{x}}}}}$$

et donc

$$\mu = \frac{k\mathrm{T}}{10m}\int \delta\mathrm{I}(\mathbf{B}):\mathbf{B}d\mathbf{W}d\mathbf{R}d\boldsymbol{a} = \frac{k\mathrm{T}}{10m}\int \mathrm{I}(\mathbf{B}):\mathbf{B}dp_x dp_a d\boldsymbol{a}$$

ou encore :

$$\mu = \frac{k\mathrm{T}}{10}[\mathbf{B}, \mathbf{B}]. \tag{85}$$

Examinons maintenant ce que donnent les conditions de compatibilité (58) pour $\mathbf{B}$: puisque $\mathbf{B} = \mathrm{B}_1\dot{\boldsymbol{i}}^0\boldsymbol{i} + \ldots + \mathrm{B}_6\dot{\boldsymbol{j}}^0\boldsymbol{k}$ et que

$$\int \boldsymbol{\alpha}^0\boldsymbol{\beta}d\omega = 0 \qquad \text{pour} \qquad \boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta} = \boldsymbol{i}, \boldsymbol{j} \text{ ou } \boldsymbol{k},$$

ces conditions d'orthogonalité sont toutes satisfaites et n'apportent aucune relation supplémentaire entre les B_i.

Passons maintenant au calcul de $\boldsymbol{\pi}_2$. On peut écrire $\boldsymbol{\pi}_2$ sous la forme :

$$\boldsymbol{\pi}_2 = -\mathbf{L}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}}\cdot\boldsymbol{u}\right).$$

$\mathbf{L}$ est un tenseur du second ordre défini par :

$$\mathbf{L} = \frac{2k\mathrm{T}}{m} \int \delta f^0 \mathrm{W}^2 \mathrm{C}\boldsymbol{ii} d\mathbf{W} d\mathbf{R} d\boldsymbol{a}$$

$$= \frac{2k\mathrm{T}}{m\pi^{s/2}} \int \rho\chi(\mathrm{T})\mathrm{N}_\mu \sqrt{8 \det \mathbf{I}e}^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\varepsilon^\nu-\frac{\Phi(\nu)}{k\mathrm{T}}} \Omega^2 \mathrm{W}^4 \mathrm{C} d\mathrm{W} d\Omega d\varphi d\mu d\nu d\bar{\nu} \times \int \boldsymbol{ii} d\omega$$

Or,

$$\int \boldsymbol{ii} d\omega = \frac{8\pi^2}{3},$$

d'où :

$$\mathbf{L} = \kappa \mathbf{1} \tag{86}$$

avec :

$$\kappa = \frac{16k\mathrm{T}}{3m\pi^{s/2-2}} \int \rho\chi(\mathrm{T})\mathrm{N}_\mu \sqrt{8 \det \mathbf{I}e}^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\varepsilon^\nu-\frac{\Phi(\nu)}{k\mathrm{T}}} \Omega^2 \mathrm{W}^4 \mathrm{C} d\mathrm{W} d\Omega d\varphi d\mu d\nu d\bar{\nu} \tag{87}$$

L'équation intégrale vérifiée par C est :

$$\mathrm{I}(\mathrm{C}) = f^0\left(\frac{2}{3}\varepsilon^t - \frac{2}{s}(\varepsilon^t + \varepsilon^i)\right).$$

Utilisons la condition d'orthogonalité (58 *b*) avec $\xi^i = \mathrm{C}$: on peut alors écrire

$$\boldsymbol{\pi}_2 = -\frac{3k\mathrm{T}}{m}\left\{\int \delta \mathrm{C}\mathrm{I}(\mathrm{C}) \frac{\mathbf{WW}}{\mathrm{W}^2} d\mathbf{W} d\mathbf{R} d\boldsymbol{a}\right\} \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{u}$$

D'après (86) le tenseur entre crochets est proportionnel au tenseur unité du second ordre. En identifiant les traces, on trouve le coefficient de proportionnalité et il vient :

$$\kappa = \frac{k\mathrm{T}}{m} \int \mathrm{C}\mathrm{I}(\mathrm{C}) d\boldsymbol{p}_x d\boldsymbol{p}_a d\boldsymbol{a},$$

ou

$$\kappa = k\mathrm{T}[\mathrm{C}, \mathrm{C}]. \tag{88}$$

Les conditions d'orthogonalité (58) s'écrivent, pour C

$$\int \mathrm{N}_\mu \sqrt{\det \mathbf{I}e}^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\varepsilon^\nu-\frac{\Phi(\nu)}{k\mathrm{T}}} \mathrm{C}\Omega^2 \mathrm{W}^2 d\mathrm{W} d\Omega d\mu_1 d\bar{\nu} = 0 \tag{89}$$

et

$$\int \mathrm{N}_\mu \sqrt{\det \mathbf{I}e}^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\varepsilon^\nu-\frac{\Phi(\nu)}{k\mathrm{T}}} (\Omega^2 + \mathrm{W}^2 + \varepsilon^\nu)\Omega^2 \mathrm{W}^2 \mathrm{C} d\mathrm{W} d\Omega d\mu d\varphi d\nu d\bar{\nu} = 0 \tag{90}$$

3.3.4. CONCLUSION. — Nous venons de montrer que, en nous limitant à l'approximation du premier ordre pour la distribution f, nous pouvons écrire les flux $\mathbf{p}$ et q sous la forme :

$$\mathbf{p} = \left(\rho \frac{k\mathrm{T}}{m} - \kappa \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \cdot \boldsymbol{u}\right) - 2\mu \frac{\overset{\circ}{\overline{\overline{\partial \boldsymbol{u}}}}}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{91}$$

$$\mathrm{q} = -\lambda \frac{\partial \mathrm{T}}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{92}$$

Les coefficients λ, μ, κ donnés respectivement par les formules (77) (ou (76)), (85) (ou (84)), (88) (ou (87)), s'identifient donc avec les coefficients classiques de conductivité thermique, de viscosité (de cisaillement) et de viscosité de volume. L'évaluation de ces coefficients nécessite le calcul des quantités [**A**, **A**], [**D**, **A**], [**B**, **B**], [C, C] et l'intégration préalable des équations intégrales :

$$\begin{cases} \mathrm{I}(\mathrm{A}) = f^0 \mathbf{W}\left(\mathrm{W}^2 + \Omega^2 + \varepsilon^{\nu} - \dfrac{s}{2} - 1\right) \\ \mathrm{I}(\mathbf{B}) = f^0 2\mathbf{W}^0\mathbf{W} \\ \mathrm{I}(\mathrm{C}) = f^0\left(\dfrac{2}{3}\mathrm{W}^2 - \dfrac{2}{s}(\mathrm{W}^2 + \Omega^2 + \varepsilon^{\nu})\right) \\ \mathrm{I}(\mathbf{D}) = f^0 \mathrm{U}(\boldsymbol{a}, \mathrm{T}) \end{cases} \tag{93}$$

Nous pouvons cependant obtenir immédiatement un résultat : la distribution f^0 est proportionnelle à ρ, qui ne dépend que de $\boldsymbol{x}$ et t. D'après la forme même des équations (93) et la définition de l'opérateur I (55), il résulte que **A**, **B**, C, **D** sont proportionnels à $\dfrac{1}{\rho}$, et donc que les quantités [**A**, **A**], [**B**, **B**], [C, C], [**D**, **A**] sont indépendantes de ρ. Donc, à l'ordre d'approximation utilisé ici, *les coefficients λ, μ, κ sont indépendants de la densité du gaz.*

L'intégration des équations (93), assorties des conditions de compatibilité (78), (89) et (90) fera l'objet du chapitre suivant.

CHAPITRE 4

Ce dernier chapitre est consacré à la mise en œuvre des moyens nécessaires à la résolution des équations intégrales définies précédemment, et à la détermination des coefficients de transport. Après avoir précisé les caractéristiques de quelques modèles particulièrement intéressants et

écrit pour ces modèles l'ensemble des équations à résoudre, nous étudions, en 4.4, les différents types de fonctions orthogonales qui interviennent dans la résolution des équations intégrales de Fredholm, lorsque nous utilisons la méthode classique qui consiste à remplacer le noyau par un noyau approché, somme de noyaux dégénérés. Nous choisissons ensuite deux modèles, M_1 et M_1^*. Sur le premier, qui possède des chocs inverses, nous développons les calculs sans toutefois opérer les quadratures extrêmement nombreuses et pénibles des intégrales qui apparaissent comme coefficients dans les équations linéaires. Sur le second, nous mettons en évidence les différences qui apparaissent, dues au fait que le modèle est de révolution et qu'il existe des chocs pseudo-inverses.

4.1. **Restriction du domaine d'intégration.**

Supposons que, dans 3.2, nous faisions choix d'un nouveau repère $\mathscr{T}'_0$, d'orientation opposée à celle de $\mathscr{T}_0$. Le vecteur rotation $\boldsymbol{\omega}$ de $\mathscr{T}$ par rapport à $\mathscr{T}'_0$ est alors l'opposé du vecteur $\boldsymbol{\omega}$. Si nous conservons le repère $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$ défini en 3.2, le vecteur $\boldsymbol{\Omega}'$ construit à partir de $\boldsymbol{\omega}'$ s'écrit $\boldsymbol{\Omega}' = -\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{j}$. Les tenseurs que nous étudions ici sont des tenseurs polaires. Leurs composantes sur les tenseurs de base définis à partir de $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$ ne dépendent pas de l'orientation de $\mathscr{T}_0$. Donc, les différentes quantités scalaires qui interviennent sont invariantes par le changement de variable $\Omega \to -\Omega$; elles ne dépendent de Ω que par l'intermédiaire de Ω^2. Ceci nous permet de définir un nouveau domaine d'intégration, noté ε^+ : ε^+ est la partie de ε correspondant à $\Omega > 0$. L'intégrale sur ε de l'une quelconque des quantités définies au chapitre 3 est égale à deux fois son intégrale sur ε^+.

4.2. **Les modèles de molécules.**

Les méthodes de résolution que nous allons développer dans ce chapitre sont applicables à un modèle quelconque de molécule satisfaisant aux différentes conditions que nous avons énoncées dans les chapitres précédents. Cependant, la description de ces méthodes soulève des difficultés d'écriture et entraine une prolifération de notations et d'indices. Pour alléger l'exposé, nous nous appuyerons sur des cas assez simples, qui permettent néanmoins de faire apparaître tous les aspects du problème général. Nous décrivons tout d'abord les deux modèles de *molécules* que nous utiliserons, repoussant à un paragraphe ultérieur la description des

modèles de *collision* correspondants et les hypothèses à faire sur ces collisions pour que le problème soit de l'un des types $\mathfrak{M}$ ou $\mathfrak{M}^*$.

4.2.1. MOLÉCULES RIGIDES. — La molécule est alors un solide, au sens habituel du terme. Dans ce cas, l'ensemble des paramètres $\boldsymbol{v}$ est vide. Le nombre des paramètres est $s = 6$.

La quantité det $\mathbf{I}$ est constante et l'on a :

$$\chi(\mathrm{T})\sqrt{8 \det \mathbf{I}} = \frac{1}{8\pi^2}.$$

Nous avons déjà signalé, que, dans ce cas la quantité D est nulle (3.1.7).

Les expressions de λ, μ, κ sont alors respectivement :

(1)
$$\lambda = \frac{4k^2\mathrm{T}}{3m^2\pi^3}\rho\int_{\varepsilon^+} \mathrm{N}_\mu \mathrm{W}^3\Omega^2(\mathrm{W}^2+\Omega^2)e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2}(\mathrm{A}_1+\mathrm{A}_2\mu_1+\mathrm{A}_3\mu_2)d\mathrm{W}d\Omega d\varphi d\boldsymbol{\mu}$$

(2)
$$\mu = \frac{2k\mathrm{T}}{15m\pi^3}\rho\int_{\varepsilon^+} \mathrm{N}_\mu\Omega^2\mathrm{W}^4e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2}(2\mathrm{B}+(3\mu_1^2-1)\mathrm{B}_2+(3\mu_2^2-1)\mathrm{B}_3 + 2\mu_1\mathrm{B}_4+(3\mu_1\mu_2-\mu_3)\mathrm{B}_5+2\mu_2\mathrm{B}_6)d\mathrm{W}d\Omega d\varphi d\boldsymbol{\mu}$$

(3)
$$\kappa = \frac{4k\mathrm{T}}{3m\pi^3}\rho\int \mathrm{N}_\mu\Omega^2\mathrm{W}^4e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2}\mathrm{C}d\mathrm{W}d\Omega d\varphi d\boldsymbol{\mu}$$

Les relations que doivent vérifier les fonctions A_i et C s'écrivent :

(4)
$$\int_{\varepsilon^+} \mathrm{N}_\mu\mathrm{W}^3\Omega^2e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2}(\mathrm{A}_1+\mathrm{A}_2\mu_1+\mathrm{A}_3\mu_2)d\mathrm{W}d\Omega d\varphi d\boldsymbol{\mu} = 0$$

(5)
$$\int_{\tilde{\varepsilon}} \mathrm{N}_\mu\mathrm{W}^2\Omega^2e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2}\mathrm{C}d\mathrm{W}d\Omega d\mu_1 = 0 \quad \forall\varphi,\ \mu_2,\ \mu_3$$

(6)
$$\int_{\varepsilon^+} \mathrm{N}_\mu\mathrm{W}^2\Omega^2(\Omega^2+\mathrm{W}^2)e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2}\mathrm{C}d\mathrm{W}d\Omega d\varphi d\boldsymbol{\mu} = 0$$

Les domaines ε^+ et $\tilde{\varepsilon}$ sont définis par :

(7)
$$\varepsilon^+ \begin{cases} \mathrm{W}>0 \quad ; \quad \Omega>0 \quad ; \quad \varphi\in[0,2\pi]\,; \\ \mu_1,\ \mu_2,\ \mu_3\in[-1,\ +1] \quad \text{avec} \quad 1-\mu_1^2-\mu_2^2-\mu_3^2+2\mu_1\mu_2\mu_3\geqslant 0. \end{cases}$$

(8)
$$\tilde{\varepsilon} \begin{cases} \mathrm{W}>0 \quad ; \quad \Omega>0\,; \\ \mu_1\in\mathscr{D}(\mu_2,\ \mu_3)\colon 1-\mu_1^2-\mu_2^2-\mu_3^2+2\mu_1\mu_2\mu_3\geqslant 0 \end{cases}$$

Quant aux équations intégrales vérifiées par **A**, **B**, C elles s'écrivent :

(9)
$$\mathrm{I}(\mathbf{A}) = f^0\mathbf{W}(\mathrm{W}^2+\Omega^2-4)$$

(10)
$$\mathrm{I}(\mathbf{B}) = f^0 2\mathbf{W}^0\mathbf{W}$$

$$\text{(11)} \qquad I(C) = f^0 \frac{1}{3}(W^2 - \Omega^2)$$

avec :

$$\text{(12)} \qquad f^0 = \rho \frac{e^{-W^2-\Omega^2}}{32\pi^5 k^3 T^3 m^{3/2} \Gamma_1 \sqrt{\Gamma_3}} \qquad \left(\int f^0 d\boldsymbol{p}_x d\boldsymbol{p}_a d\boldsymbol{a} = 1 \right)$$

On notera que, avec des définitions légèrement différentes pour A_i, B_i, C, les formules (18) à (31) de [*30*] sont des spécialisations des formules précédentes dans un cas particulier où l'orientation des molécules ne joue aucun rôle.

4.2.2. Molécule a un degré de vibration. — Ce modèle schématise une molécule diatomique considérée comme un oscillateur harmonique : deux atomes sphériques identiques sont reliés par un ressort linéaire de dureté η et de longueur au repos l_0. Nous supposerons la dureté du ressort suffisante pour que l'amplitude des vibrations, ainsi que l'allongement du au mouvement de rotation global de la molécule soient faibles devant l_0. Cette hypothèse nous permet de supposer aussi que le moment d'inertie transversal Γ_1 de la molécule en son centre est pratiquement constant. Le mouvement d'une telle molécule est alors défini par l'énergie cinétique

$$\frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{\Gamma_1}{2}(\omega_1^2 + \omega_2^2) + \frac{\Gamma_3}{2}\omega_3^2 + \frac{m\dot{l}^2}{2},$$

et le potentiel intra-moléculaire $\Phi(l) = \frac{\eta}{2}(l - l_0)^2$.

L'ensemble des variables $\boldsymbol{v}$ est réduit à l, et celui des variables $\bar{\boldsymbol{v}}$ à $\frac{m\dot{l}}{\sqrt{kT}}$. Nous poserons :

$$\Lambda = \sqrt{\frac{m}{2kT}}\,\dot{l} \qquad \text{d'où} \qquad d\bar{\boldsymbol{v}} = \sqrt{2m}\,d\Lambda,$$

et

$$L = \sqrt{\frac{\eta}{2kT}}(l - l_0), \qquad \text{d'où} \qquad d\boldsymbol{v} = \sqrt{\frac{2kT}{\eta}}\,dL.$$

Les domaines de variation de Λ et L, sont $]-\infty, +\infty[$. On a alors, pour les différentes quantités qui interviennent dans les expressions du chapitre 3, les valeurs suivantes :

$$\begin{cases} s = 7 \;\; ; \;\; \sqrt{\det \mathbf{I}} = \Gamma_1\sqrt{\Gamma_3} \;\; ; \;\; \varepsilon^v = \Lambda^2 \;\; ; \;\; \det \varepsilon^v = \dfrac{1}{2m} \;\; ; \;\; \dfrac{\Phi(v)}{kT} = L^2 ; \\ \chi(T) = \dfrac{1}{8\pi^{3/2}}\sqrt{\dfrac{\eta}{32kT\Gamma_1^2\Gamma_3 m}} ; \end{cases}$$

d'où

$$\rho\chi(\mathrm{T})\sqrt{\det \mathbf{I}}\,d\boldsymbol{v}d\bar{\boldsymbol{v}} = \frac{\rho}{8\pi^{3/2}}\,d\mathrm{L}d\Lambda.$$

La quantité $\mathrm{U}(\boldsymbol{v}, t)$, dont l'expression figure dans la formule (3.93) s'écrit ici $\mathrm{U} = \mathrm{L}^2 - \frac{1}{2}$.

Les expressions de λ, μ, sont respectivement :

$$(13)\quad \lambda = \frac{4k^2\mathrm{T}}{3m^2\pi^4}\rho\int_{\varepsilon^+} \mathrm{W}^3\Omega^2(\mathrm{W}^2+\Omega^2+\Lambda^2)\mathrm{N}_\mu e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2}((\mathrm{A}_1+\mathrm{D}_1) + (\mathrm{A}_2+\mathrm{D}_2)\mu_1+(\mathrm{A}_3+\mathrm{D}_3)\mu_3)d\mathrm{W}d\Omega d\Lambda d\mathrm{L}d\varphi d\boldsymbol{\mu}$$

$$(14)\quad \mu = \frac{2k\mathrm{T}}{15m\pi^4}\rho\int_{\varepsilon^+} \mathrm{N}_\mu\Omega^2\mathrm{W}^4 e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2}(2\mathrm{B}_1+(3\mu_1^2-1)\mathrm{B}_2+(3\mu_2^2-1)\mathrm{B}_3 + 2\mu_1\mathrm{B}_4+(3\mu_1\mu_2-\mu_3)\mathrm{B}_5+2\mu_2\mathrm{B}_6)d\mathrm{W}d\Omega d\Lambda d\mathrm{L}d\varphi d\boldsymbol{\mu}$$

$$(15)\quad \kappa = \frac{4k\mathrm{T}}{3m\pi^4}\rho\int_{\varepsilon^+} \mathrm{N}_\mu\Omega^2\mathrm{W}^4 e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2}\mathrm{C}d\mathrm{W}d\Omega d\Lambda d\mathrm{L}d\varphi d\boldsymbol{\mu}$$

Les relations que doivent vérifier les quantités A_i, D_i, C s'écrivent :

$$(16)\quad \int_{\varepsilon^+} \mathrm{N}_\mu\mathrm{W}^3\Omega^2 e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2}\begin{Bmatrix}\mathrm{A}_1+\mathrm{A}_2\mu_1+\mathrm{A}_3\mu_2\\ \mathrm{D}_1+\mathrm{D}_2\mu+\mathrm{D}_3\mu_2\end{Bmatrix}d\mathrm{W}d\Omega d\Lambda d\mathrm{L}d\varphi d\boldsymbol{\mu}=0$$

$$(17)\quad \int_{\varepsilon} \mathrm{N}_\mu\mathrm{W}^2\Omega^2 e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2}\mathrm{C}d\mathrm{W}d\Omega d\Lambda d\mu_1 = 0 \qquad \varphi,\ \mathrm{L},\ \mu_2,\ \mu_3$$

$$(18)\quad \int_{\varepsilon^+} \mathrm{N}_\mu\mathrm{W}^2\Omega^2(\Omega^2+\mathrm{W}^2+\Lambda^2)e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2}\mathrm{C}d\mathrm{W}d\Omega d\Lambda d\mathrm{L}d\varphi d\boldsymbol{\mu} = 0$$

Les domaines ε^+ et $\bar{\varepsilon}$ sont définis ici par :

$$(19)\quad \varepsilon^+ \begin{cases} \mathrm{W},\ \Omega>0 \quad ; \quad \Lambda,\ \mathrm{L}\in]-\infty,\ +\infty[\quad ; \quad \varphi\in[0,\ 2\pi]\,; \\ \mu_1,\ \mu_2,\ \mu_3\in[-1,\ +1] \quad \text{avec} \quad 1-\mu_1^2-\mu_2^2-\mu_3^2+2\mu_1\mu_2\mu_3\geqslant 0\,; \end{cases}$$

$$(20)\quad \bar{\varepsilon} \begin{cases} \mathrm{W},\ \Omega>0 \quad ; \quad \Lambda\in]-\infty,\ +\infty[\,; \\ \mu_1\in\mathscr{D}(\mu_2,\ \mu_3):\ 1-\mu_1^2-\mu_2^2-\mu_3^2+2\mu_1\mu_2\mu_3\geqslant 0. \end{cases}$$

Les équations intégrales vérifiées par **A**, **B**, C, **D** s'écrivent :

$$(21)\quad \mathrm{I}(\mathrm{A}) = f^0\mathbf{W}\left(\mathrm{W}^2+\Omega^2+\Lambda^2-\frac{9}{2}\right)$$

$$(22)\quad \mathrm{I}(\mathbf{B}) = f^0 2\mathbf{W}^0\mathbf{W}$$

$$(23)\quad \mathrm{I}(\mathrm{C}) = f^0\left(\frac{8}{21}\mathrm{W}^2-\frac{2}{7}\Omega^2-\frac{2}{7}\Lambda^2\right)$$

(24) $$\mathrm{I}(\mathbf{D}) = f^0\left(\mathrm{L}^2 - \frac{1}{2}\right)$$

avec

(25) $$f^0 = \rho\sqrt{\frac{\eta}{\Gamma_3}}\,\frac{e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2}}{32mk^4\mathrm{T}^4\pi^6\Gamma_1} \qquad \left(\int f^0 dp_x dp_a d\boldsymbol{a} = 1\right)$$

4.2.3. Modèles « de révolution ». — Si le modèle moléculaire est tel que la molécule est de révolution autour d'un axe (que l'on choisit alors comme axe $\boldsymbol{k}$) on peut concevoir des collisions telles que, au cours du choc, la projection du moment cinétique de chaque molécule sur son axe reste constante : c'est par exemple le cas des chocs parfaits, puisque la percussion de contact rencontre alors les axes des deux molécules. Dans ce cas, la projection du moment cinétique sur $\boldsymbol{k}$, qui est un invariant du mouvement de la molécule libre, est un invariant sommatoire dégénéré. Aucune des quantités intervenant dans le problème ne dépend plus de φ. Dans tous les cas où le moment d'inertie de la molécule autour de $\boldsymbol{k}$ est constant, l'invariance de la projection du moment cinétique sur $\boldsymbol{k}$ entraîne l'invariance de l'énergie cinétique de rotation autour de $\boldsymbol{k}$, qui vaut

$$\Gamma_3\omega_z^2 = \frac{1}{\Gamma_3}(\Gamma_3\omega_z)^2.$$

Il n'y a aucun échange possible entre cette énergie de rotation et le reste de l'énergie cinétique de la molécule : le degré de liberté correspondant est alors dit *gelé*. Conformément aux définitions précédemment données, le nombre de degrés de liberté du système doit alors être diminué d'une unité. On doit scinder l'énergie cinétique de rotation en deux parties :

$$\boldsymbol{\omega}\cdot\mathbf{I}\cdot\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{\omega}_e\cdot\mathbf{I}\cdot\boldsymbol{\omega}_e + \Gamma_3\omega_z^2,$$

en désignant par $\boldsymbol{\omega}_e$ la composante équatoriale de la rotation. Seul le premier terme de la somme fait partie de l'énergie échangeable (et donc donne un terme de H″ dans la théorie générale).

On sera alors amené à considérer, au lieu de $\boldsymbol{\Omega}$, le vecteur $\boldsymbol{\Omega}_e$ (cf. (3.63)) :

$$\boldsymbol{\Omega}_e = \left(\frac{\Gamma_1}{2k\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{\omega}_e.$$

Dans ces conditions, on a

$$\mu_3 = 0 \quad , \quad \varepsilon^i = \Omega_e^2 + \varepsilon^v,$$

$$f^0 = \frac{\rho}{\sqrt{8m^3}}\,\frac{\chi(\mathrm{T})}{(\pi k\mathrm{T})^{s/2}}\,e^{-\mathrm{W}^2-\Omega_e^2-\frac{\Phi(v)}{k\mathrm{T}}} \quad , \quad \frac{1}{\chi(\mathrm{T})} = 8\pi^2\Gamma_1\int\frac{e^{-\frac{\Phi(v)}{k\mathrm{T}}}}{\sqrt{\det\varepsilon_v}}\,d\boldsymbol{v}.$$

L'intégrale (3.66) s'écrit alors :

$$\int \mathbf{T}\delta f^0 \Gamma_1 \frac{\sin \beta \Omega_e^2 W^2}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} dW d\Omega_e d\mu_1 d\mu_2 d\alpha d\beta d\gamma d\boldsymbol{v} d\bar{\boldsymbol{v}} \tag{26}$$

En effet, dans tous les calculs, μ_3 reste égal à zéro, puisque $\boldsymbol{\Omega}_e$ est orthogonal à $\boldsymbol{k}$. Ceci nous permet d'obtenir les formules suivantes, dans les deux cas décrits précédemment, lorsque la collision est un choc parfait :

4.2.3.1. *Solide de révolution avec choc parfait.*

$$\lambda = \frac{8k^2T}{3m^2\pi^{3/2}}\rho \int_{\varepsilon^*} \frac{W^3\Omega_e^2(W^2+\Omega_e^2)}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} e^{-W^2-\Omega_e^2}(A_1+A_2\mu_1 + A_3\mu_2) dW d\Omega_e d\mu_1 d\mu_2 \tag{27}$$

$$\mu = \frac{4kT}{15m\pi^{3/2}}\rho \int_{\varepsilon^*} \frac{\Omega_e^2 W^4}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} e^{-W^2-\Omega_e^2}(2B_1+(3\mu_1^2-1)B_2 + (3\mu_2^2-1)B_3 + 2\mu_1 B_1 + 3\mu_1\mu_2 B_5 + 2\mu_2 B_6) dW d\Omega_e d\mu_1 d\mu_2 \tag{28}$$

$$\kappa = \frac{8kT}{3m\pi^{3/2}}\rho \int_{\varepsilon^*} \frac{\Omega_e^2 W^4}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} e^{-W^2-\Omega_e^2} C dW d\Omega_e d\mu_1 d\mu_2 \tag{29}$$

Les conditions que doivent vérifier les A_i et C s'écrivent :

$$\int_{\varepsilon^*} \frac{W^3\Omega_e^2}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} e^{-W^2-\Omega_e^2}(A_1+A_2\mu_1+A_3\mu_2) dW d\Omega_e d\mu_1 d\mu_2 = 0 \tag{30}$$

$$\int_{\tilde{\varepsilon}^*} \frac{W^2\Omega_e^2}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} e^{-W^2-\Omega_e^2} C dW d\Omega_e d\mu_1 = 0 \qquad \forall \mu_2 \tag{31}$$

$$\int_{\varepsilon^*} \frac{W^2\Omega_e^2(\Omega_e^2+W^2)}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} e^{-W^2-\Omega_e^2} C dW d\Omega_e d\mu_1 d\mu_2 = 0 \tag{32}$$

Les domaines ε^* et $\tilde{\varepsilon}^*$ sont définis par :

$$\varepsilon^* : W \geqslant 0 \quad , \quad \Omega_e \geqslant 0 \quad , \quad \mu_1, \mu_2 \in [-1, +1] : 1-\mu_1^2-\mu_2^2 \geqslant 0 ; \tag{33}$$

$$\tilde{\varepsilon}^* : W \geqslant 0 \quad , \quad \Omega_e \geqslant 0 \quad , \quad \mu_1 \in \mathscr{D}(\mu_2) : 1-\mu_1^2-\mu_2^2 \geqslant 0. \tag{34}$$

Quant aux équations intégrales vérifiées par **A**, **B**, C, elles s'écrivent :

$$I(A) = f^0 \mathbf{W}\left(W^2 + \Omega_e^2 - \frac{7}{2}\right) \tag{35}$$

$$I(\mathbf{B}) = f^0 2 \mathbf{W}^0 \mathbf{W} \tag{36}$$

$$\text{(37)} \qquad \mathrm{I(C)} = f^0\left(\frac{4}{15}\mathrm{W} - \frac{2}{5}\Omega_e^2\right)$$

On remarquera que dans [*26*] on trouve des formules qui sont des cas particuliers de celles que nous venons d'obtenir ici.

4.2.3.2. *Molécule du type 2 avec choc parfait.*

$$\text{(38)} \quad \lambda = \frac{8k^2\mathrm{T}}{3m^2\pi^{5/2}}\rho \int_{\varepsilon^*} \frac{\mathrm{W}^3\Omega_e^2(\mathrm{W}^2+\Omega_e^2+\Lambda^2)}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} e^{-\mathrm{W}^2-\Omega_e^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2}(\mathrm{A}_1+\mathrm{D}_1 + (\mathrm{A}_2+\mathrm{D}_2)\mu_1+(\mathrm{A}_3+\mathrm{D}_3)\mu_2)d\mathrm{W}d\Omega_e d\mathrm{L}d\Lambda d\mu_1 d\mu_2$$

$$\text{(39)} \quad \mu = \frac{4k\mathrm{T}}{15m\pi^{5/2}}\rho \int_{\varepsilon^*} \frac{\mathrm{W}^4\Omega_e^2}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} e^{-\mathrm{W}^2-\Omega_e^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2}((2\mathrm{B}_1+(3\mu_1^2-1)\mathrm{B}_2 + (3\mu_2^2-1)\mathrm{B}_3+2\mu_1\mathrm{B}_4+3\mu_1\mu_2\mathrm{B}_5+2\mu_2\mathrm{B}_6)d\mathrm{W}d\Omega_e d\mathrm{L}d\Lambda d\mu_1 d\mu_2$$

$$\text{(40)} \quad \kappa = \frac{8k\mathrm{T}}{3m\pi^{5/2}}\rho \int_{\varepsilon^*} \frac{\mathrm{W}^4\Omega_e^2}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} e^{-\mathrm{W}^2-\Omega_e^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2}\mathrm{C}d\mathrm{W}d\Omega_e d\mathrm{L}d\Lambda d\mu_1 d\mu_2$$

Les conditions que doivent vérifier les A_i, D_i et C s'écrivent :

$$\text{(41)} \quad \int_{\varepsilon^*} \frac{\mathrm{W}^3\Omega_e^2}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} e^{-\mathrm{W}^2-\Omega_e^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2} \left\{\begin{matrix} \mathrm{A}_1 + \mathrm{A}_2\mu_1 \\ \mathrm{D}_1 + \mathrm{D}_2\mu_1 \end{matrix}\right. \left.\begin{matrix} + \mathrm{A}_2\mu_2 \\ + \mathrm{D}_3\mu_2 \end{matrix}\right\} d\mathrm{W}d\Omega_e d\Lambda d\mathrm{L}d\mu_1 d\mu_2 = \left\{\begin{matrix} 0 \\ 0 \end{matrix}\right.$$

$$\text{(42)} \quad \int_{\tilde{\varepsilon}^*} \frac{\mathrm{W}^2\Omega_e^2}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} e^{-\mathrm{W}^2-\Omega_e^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2}\mathrm{C}d\mathrm{W}d\Omega_e d\Lambda d\mu_1 = 0 \qquad \forall \mathrm{L},\ \mu_2$$

$$\text{(43)} \quad \int_{\varepsilon^*} \frac{\mathrm{W}^2\Omega_e^2(\mathrm{W}^2+\Omega_e^2+\Lambda^2)}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2}} e^{-\mathrm{W}^2-\Omega_e^2-\Lambda^2-\mathrm{L}^2}\mathrm{C}d\mathrm{W}d\Omega_e d\Lambda d\mathrm{L}d\mu_1 d\mu_2 = 0$$

Les domaines ε^*, $\tilde{\varepsilon}^*$ sont définis par les formules (33) et (34) en ajoutant : Λ, $\mathrm{L} \in]-\infty, +\infty[$.

Les équations intégrales vérifiées par **A**, **B**, C, **D** s'écrivent :

$$\text{(44)} \qquad \mathrm{I}(\mathbf{A}) = f^0\mathbf{W}(\mathrm{W}^2 + \Omega_e^2 + \Lambda^2 - 4)$$

$$\text{(45)} \qquad \mathrm{I}(\mathbf{B}) = f^0 2\mathbf{W}^0\mathbf{W}$$

$$\text{(46)} \qquad \mathrm{I}(\mathrm{C}) = f^0\frac{1}{3}(\mathrm{W}^2 - \Omega_e^2 - \Lambda^2)$$

$$\text{(47)} \qquad \mathrm{I}(\mathbf{D}) = f^0\left(\mathrm{L}^2 - \frac{1}{2}\right)$$

4.3. **Les modèles de collisions.**

4.3.1. COLLISIONS CONDUISANT A UN MODÈLE $\mathfrak{M}$. — Nous avons rangé dans ces modèles (voir 2.2.6) :

a) les chocs parfaits où existent des chocs inverses,

b) les chocs élastiques de sphères rigides partiellement ou totalement rugueuses.

Pour les modèles de *b*) les paramètres qui fixent l'orientation de la sphère ne jouent aucun rôle ; par contre, le nombre des degrés de liberté libres est de 6, car aucun n'est « gelé » : il y a, au cours du choc, échange d'énergie entre la translation et la rotation.

Dans les formules (1) à (11), aucune des quantités A_i, B_i, C ne dépend de μ_2, μ_3 et φ. On peut alors procéder à une intégration par rapport à ces trois variables et l'on retrouve, comme nous l'avons déjà signalé les formules de [*30*]. Nous n'irons pas plus loin dans la description de ce cas, étudié en détail dans [*30*], [*32*] et [*33*].

Les modèles de *a*) étudiés en 1.10, ont une zone d'action qui est une sphère de rayon invariable, et le choc entre deux telles sphères est parfait. Le moment cinétique d'une molécule au centre de sa sphère d'action est inchangé au cours du choc.

— Si la molécule est telle que son centre d'inertie est confondu avec le centre de la sphère d'action, et si le tenseur d'inertie en ce point est constant, l'énergie de rotation de la molécule reste fixe, aussi bien dans le mouvement qu'au cours du choc. De plus, aucun échange d'énergie ne peut avoir lieu entre l'énergie de translation et l'énergie interne. Le nombre de degrés « libres » est alors réduit à 3, et la théorie de ces modèles ne diffère en rien de celle des modèles monoatomiques [*4*].

— Par contre, si le centre d'inertie de la molécule n'est pas confondu avec le centre de la sphère d'action, un échange peut se produire au cours du choc entre l'énergie cinétique de translation et l'énergie interne. Le nombre exact des degrés « libres » dépend de la structure même de la molécule. Par exemple, si la molécule elle-même est un solide, le nombre de degrés « libres » est 6 dans le cas général, 5 lorsque le tenseur central d'inertie est de révolution et le centre de la zone d'action sur l'axe de révolution. Ce dernier cas est traité dans [*31*] et [*33*], sous *l'hypothèse supplémentaire que la fonction de distribution f ne dépend pas de l'orientation de la molécule* : ceci revient à supposer que les diverses quantités A_i, B_i, C ne dépendent ni de μ_2, ni de μ_3, ni de φ. Procédant alors comme pour les sphères rugueuses,

en intégrant les équations (27) à (37) par rapport à μ_1, μ_2, φ, on retrouve les équations de [*30*]. Nous disposons cependant dans cette étude des méthodes qui permettent de nous affranchir de cette hypothèse supplémentaire.

— Le cas où le centre d'inertie et le centre de la zone d'action seraient confondus mais le tenseur central d'inertie non constant, correspondrait à un échange d'énergie, aussi bien au cours du mouvement libre que du choc, entre degrés de liberté interne, mais à une absence d'échange entre l'énergie de translation et l'énergie interne. Ce cas n'offre, semble-t-il, aucun intérêt dans la pratique, aussi nous n'en parlerons pas plus.

4.3.2. Collisions conduisant a un modèle $\mathfrak{M}^*$. — Nous avons vu en 1.11 que, pour des molécules dont le centre d'inertie est centre de symétrie de la zone d'action, on peut définir, pour toute configuration de choc, une configuration de choc pseudo-inverse.

La théorie que nous avons exposée est valable *sous réserve de supposer que la fonction f satisfait à l'hypothèse $\mathscr{H}^*$* de 2.2.4 qui se traduit ici par $f(-\boldsymbol{p}_a) = f(\boldsymbol{p}_a)$. Les différentes fonctions A_i, B_i, C, D_i sont alors des fonctions paires de chacune des variables v_i, ainsi que de l'ensemble des deux variables μ_1 et μ_3. Si la molécule est elle-même symétrique par rapport à son centre d'inertie, deux molécules qui ne diffèrent que par le *sens* du vecteur $\boldsymbol{k}$ choisi sont « indiscernables ». Il est donc naturel de considérer alors la fonction de distribution constituée de la demi-somme

$$\frac{1}{2}(f(\boldsymbol{k}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{v}, \bar{\boldsymbol{v}}, \varphi) + f(-\boldsymbol{k}, \mathbf{W}, \boldsymbol{\Omega}, \boldsymbol{v}, \bar{\boldsymbol{v}}, \varphi)).$$

Il est aisé de vérifier que cette fonction, que nous continuerons à désigner par f, satisfait à l'équation de Boltzmann (sous l'hypothèse $\mathscr{H}^*$). Les quantités A_i, B_i, C, D_i correspondantes sont des fonctions paires de l'ensemble des deux variables μ_2, μ_3 ; elles sont donc aussi des fonctions paires de l'ensemble des deux variables μ_1 et μ_2. Dans le cas de modèles de révolution de 4.2.3 ceci impliquera que ces quantités ne dépendent de μ_1 et μ_2 que par l'intermédiaire de μ_1^2 et μ_2^2.

On peut d'ailleurs diminuer la complexité des calculs en renforçant l'hypothèse $\mathscr{H}^*$: c'est ce qui est fait dans [*26*] et [*31*] en particulier, où l'on trouve l'hypothèse, plausible pour des molécules à répartition de masse proche d'une répartition sphérique, que la fonction de distribution est indépendante de l'orientation de la molécule. Compte tenu de la symétrie de la molécule, il est facile de montrer, par des manipulations analogues à celles de 1.11, que, pour des molécules rigides, cette hypothèse entraîne les mêmes conclusions que $\mathscr{H}^*$. On peut alors intégrer par rapport aux

variables μ_2, μ_3 et φ, et les fonctions A_i, B_i, C, D_i ne dépendent plus que de W^2, Ω^2, μ_1^2, $\bar{v}_i^2$ et $\boldsymbol{v}$. Les formules correspondantes s'obtiennent alors immédiatement à partir de celles de 4.2.2 ou 4.2.1, selon que les molécules sont ou non de révolution.

Nous ne nous étendrons pas sur ce cas, traité par ailleurs mais nous devons cependant noter qu'il est nécessaire, si l'on veut conserver aux équations intégrales qui définissent **A**, **B**, C, **D** une forme analogue à celle qu'elles ont en 4.2, de changer la définition de l'opérateur intégral I : en effet, même si f ne dépend pas de l'orientation de la molécule, la quantité $Y(g)d\sigma$ en dépend. Les formules en cause ne conservent leur forme que si l'on prend pour nouvelle définition de l'opérateur I la valeur moyenne

$$\frac{1}{4\pi}\int I d\omega$$

(cf. [*26*] et [*31*]).

4.3.3. *En résumé*, les modèles les plus simples auxquels s'applique notre théorie, sont, si nous excluons ceux qui sont traités dans les différentes publications citées, les suivants :

a) molécule à zone d'action sphérique de rayon constant ; la molécule est ou non de révolution ; le centre d'inertie ne coïncide pas avec le centre de la sphère d'action ; la fonction de distribution dépend de l'orientation de la molécule. Pour ce modèle existent des chocs inverses, et donc, d'après les résultats de 3.4, l'opérateur $\mathscr{L}$ est symétrique. On se limitera comme dans 4.2 aux cas où le nombre des degrés de liberté internes est 0 ou 1.

b) molécule ayant un centre de symétrie, confondu avec le centre d'inertie, pour sa zone d'action ; la fonction de répartition est soumise à l'hypothèse $\mathscr{H}^*$. Les diverses quantités qui interviennent sont des fonctions paires de $\bar{v}_i$ et des couples de variables $\mu_1\mu_2$, $\mu_2\mu_3$ et $\mu_3\mu_1$. L'opérateur $\mathscr{L}$ n'est pas symétrique en général.

4.4. **Les fonctions orthogonales.**

Pour résoudre les équations intégrales de 4.2, nous allons utiliser une méthode d'approximation du noyau par une somme de noyaux dégénérés [*30*], Nous utiliserons pour cela une décomposition du noyau en série de produits de fonctions orthogonales. Ce sont ces fonctions que nous allons étudier dans ce paragraphe.

Les quantités qui interviennent en 4.2 sont fonctions des variables W^2 ;

Ω^2 ; Λ ; L ; φ ; μ_1, μ_2, μ_3 ou de certaines d'entre elles seulement. Les noyaux des différentes intégrales se présentent sous la forme

$$\frac{P(W, \Omega, \Lambda)e^{-W^2-\Omega^2-L^2-\Lambda^2}}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2^2-\mu_3^2+2\mu_1\mu_2\mu_3}}.$$

Nous sommes donc amenés à rechercher une décomposition d'une fonction $T(W^2, \Omega^2, \Lambda, L, \varphi, \mu_1, \mu_2, \mu_3)$ sous forme d'une somme de termes du type $f_W(W^2)f_\Omega(\Omega^2)f_\Lambda(\Lambda)f_L(L)f_\varphi(\varphi)f_\mu(\mu_1, \mu_2, \mu_3)$, chacune des familles f_W, f_Ω, f_Λ, f_L, f_φ, f_μ étant orthogonale par rapport à un noyau et un domaine spécifique que nous allons préciser.

4.4.1. Famille des fonctions f_φ. — L'intervalle d'intégration étant $[0,2\pi]$, nous utiliserons comme fonctions de base les fonctions $\cos n\varphi$ et $\sin n\varphi$; le développement en série de la fonction T par rapport à φ est alors un développement de Fourier classique, pour lequel les conditions de convergence sont bien connues.

4.4.2. Polynômes de Sonine. — Pour les variables Ω^2 et W^2 ainsi que pour la variable Λ^2 lorsque les fonctions cherchées sont supposées paires par rapport à Λ, l'intervalle d'intégration est $[0, +\infty[$, et le noyau de la forme $y^{2k}e^{-y^2}$, avec $y = \Omega$, W ou Λ. Nous utiliserons alors comme base les polynômes de Sonine, dont nous regrouperons ci-dessous les propriétés essentielles. Ces polynômes sont connues aussi sous le nom de polynômes de Laguerre, mais comme ils sont historiquement utilisés en théorie cinétique sous le nom de Sonine, nous conserverons cette dénomination.

Pour toute valeur du nombre réel a supérieure à -1, $S_n^a(x)$ est défini par

$$S_n^a(x) = \frac{1}{n!}e^x x^{-a}\frac{d}{dx^n}(e^{-x}x^{n+a}).$$

Trois polynômes d'indices consécutifs vérifient la relation de récurrence :

$$(n+1)S_{n+1}^a(x) - (2n+a+1-x)S_n^a(x) + (n+a)S_{n-1}^a(x) = 0.$$

Les polynômes de même indice a forment une famille orthogonale sur l'intervalle $[0, +\infty[$, par rapport au noyau $e^{-x}x^a$:

$$\int_0^\infty e^{-x}x^a S_n^a(x)S_m^a(x)dx = \delta_{nm}\frac{\Gamma(n+a+1)}{n!} \tag{48}$$

Les deux premiers polynômes de chaque famille sont

$$S_0^a(x) = 1 \qquad \text{et} \qquad S_1^a(x) = 1 + a - x.$$

On montre aisément que :

$$(49)\qquad \int_0^\infty e^{-x}x^a S_i^a(x)dx = \begin{cases} \Gamma(a+1) & \text{pour} \quad i=0 \\ 0 & \text{pour} \quad i>0 \end{cases}$$

et que

$$(50)\qquad \int_0^\infty e^{-x}x^a S_i^a(x)x dx = \begin{cases} \Gamma(a+2) & \text{pour} \quad i=0 \\ -\Gamma(a+2) & \text{pour} \quad i=1 \\ 0 & \text{pour} \quad i>1 \end{cases}$$

Soit L_ω^2 l'ensemble des fonctions telles que

$$\| f \| = \int^\infty e^{-x}x^{+a} \mid f(x) \mid^2 dx$$

existe. Le développement d'une fonction $f(x) \in L_\omega^2$ en série de polynômes de Sonine donne les coefficients de Fourier

$$A_n = \frac{1}{h_n} \int_0^\infty e^{-x}x^a f(x) S_n^a(x)dx$$

où

$$h_n = \int_0^\infty e^{-x}x^a \mid S_n^a(x) \mid^2 dx = \frac{\Gamma(a+n+1)}{n!}.$$

On montre que la série $\Sigma A_n S_n^a(x)$ converge dans L_ω^2 vers $f(x)$ au sens de la norme précédente (cf. [*41*]). On utilisera dans la suite, les polynômes $S_n^a(x)$ pour les valeurs $a = 1, 1/2, 3/2$. Si la fonction $U(x^2)$ admet le développement

$$U(x^2) = \sum_{j=0}^{\infty} X_j^a S_j^a(x^2)$$

et si l'on pose $y = x^2$, on a :

avec $a = 1$:

$$(51)\qquad \int_0^\infty x^3 e^{-x^2} U(x^2)dx = \frac{1}{2}\int^\infty y e^{-y}\left(\sum_j X^j S_j^1(y)\right)dy = \frac{X_0^1}{2}$$

$$(52)\qquad \int_0^\infty x^5 e^{-x^2} U(x^2)dx = \frac{1}{2}\int^\infty y e^{-y}\left(\sum_j X_j^1 S_j^1(y)\right)y dy = X_0^1 - X_1^1$$

avec $a = \frac{1}{2}$:

$$(53)\qquad \int_0^\infty x^2 e^{-x^2} U(x^2)dx = \frac{1}{2}\int^\infty y^{1/2} e^{-y}\left(\sum_j X_j^{1/2} S_j^{1/2}(y)\right)dy = \frac{\sqrt{\pi}}{4} X_0^{1/2}$$

(54)

$$\int_0^x x^4 e^{-x^2} U(x^2) dx = \frac{1}{2} \int_0^x y^{1/2} e^{-y} \left(\sum_j X_j^{1/2} S_j^{1/2}(y) \right) y dy = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} (X_0^{1/2} - X_1^{1/2})$$

avec $a = \frac{3}{2}$:

$$\int_0^x x^4 e^{-x^2} U(x^2) dx = \frac{1}{2} \int_0^x y^{3/2} e^{-y} \left(\sum_j X_j^{3/2} S_j^{3/2}(y) \right) dy = \frac{3\sqrt{\pi}}{8} X_0^{3/2} \tag{55}$$

4.4.3. Polynômes d'Hermite. — Pour la variable L (et Λ lorsque les fonctions ne sont pas supposées paires en Λ), l'intervalle d'intégration est $]-\infty, +\infty[$ et le noyau e^{-L^2} (ou $\Lambda^2 e^{-\Lambda^2}$). Nous sommes donc amenés à utiliser comme polynômes de base les polynômes d'Hermite définis par

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}),$$

ou par la relation de récurrence $H_{n+1}(x) - 2xH_n(x) + 2nH_{n-1}(x) = 0$, avec $H_0(x) = 1$ et $H_1(x) = 2x$.

La relation d'orthogonalité est :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx = \delta_{mn} \sqrt{\pi} 2^n n! \tag{56}$$

Le développement d'une fonction $f(x)$ appartenant à l'espace $\mathscr{L}_\omega^2$ des fonctions pour lesquelles

$$\| f \| = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} | f(x) |^2 dx$$

existe, conduit aux coefficients de Fourier

$$B_n = \frac{1}{h_n} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} f(x) H_n(x) dx$$

où

$$h_n = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} | H_n(x) |^2 dx = \sqrt{\pi} 2^n n!.$$

Ici encore la série $\Sigma B_n H_n(x)$ converge dans $\mathscr{L}_\omega^2$ vers $f(x)$ au sens de la norme précédente.

Si $V(x) = \sum_{j=0}^{\infty} Y_j H_j(x)$, on utilisera

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} V(x) dx = \sqrt{\pi} Y_0 \tag{56}$$

et

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2} V(x) dx = \sqrt{\pi}\left(2Y_2 + \frac{Y_0}{2}\right) \tag{57}$$

4.4.4. Famille des fonctions f_μ. — Désignons par ω la fonction des 3 variables réelles x, y, z :

$$\omega = \frac{1}{\pi}(1 - x^2 - y^2 - z^2 + 2xyz)^{-1/2},$$

par Δ le domaine compact de R^3, ensemble des points de coordonnées x, y, z vérifiant l'inégalité $1 - x^2 - y^2 - z^2 + 2xyz \geq 0$, et par Δ_x le domaine compact de R, ensemble des valeurs de x, vérifiant, pour y et z fixés, l'inégalité précédente.

Nous allons construire une famille de polynômes à 3 variables, orthogonale sur Δ par rapport au noyau ω. Nous donnons tout d'abord quelques propriétés des polynômes de Legendre, liées à notre problème. Le polynôme de Legendre de degré n, noté $L^n(x)$ est défini par

$$L^n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n}[(x^2 - 1)^n].$$

Ces polynômes satisfont à la relation de récurrence

$$(n + 1)L^{n+1}(x) = (2n + 1)xL^n(x) - nL^{n-1}(x) \tag{58}$$

et à la relation d'orthogonalité

$$\int_{-1}^{+1} L^p(x)L^q(x)dx = \frac{\delta^{pq}}{p + \frac{1}{2}}. \tag{59}$$

Le coefficient de plus haut degré de $L^n(x)$ est

$$k_n = 2^n \frac{\Gamma\left(n + \frac{1}{2}\right)}{n!\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}.$$

4.4.4.1. Démontrons tout d'abord l'égalité

$$\int_{\Delta_x} \omega L^p(x)dx = L^p(y)L^p(z) \tag{60}$$

Pour cela, nous posons $x = \cos a$; $y = \cos b$; $z = \cos c$, et nous définissons A par $\cos a = \cos b \cos c + \sin a \sin b \cos A$. En écrivant

$$\frac{1}{\pi^2\omega^2} = (1 - y^2)(1 - z^2) - (x - yz)^2,$$

il vient

$$\frac{1}{\omega} = \pi \sin b \sin c \sin A.$$

Comme

$$\left| \frac{D(x, y, z)}{D(A, y, z)} \right| = \sin b \sin c,$$

on peut écrire le premier membre de (60) sous la forme

$$\int_{\Delta_x} \omega L^p(x)dx = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi L^p (\cos b \cos c + \sin b \sin c \cos A)dA \tag{61}$$

Or, le théorème d'addition des polynômes de Legendre [*41*] permet d'écrire

$$L^p (\cos b \cos c + \sin b \sin c \cos A) = L^p (\cos b)\, L^p (\cos c) + 2 \sum_{q=1}^{p} \frac{(p-q)!}{(p+q)!} L_p^q (\cos b)\, L_p^q (\cos c) \cos qA$$

où L_p^q désigne la fonction de Legendre associée de première espèce.

En reportant dans (61) et en intégrant par rapport à A, il vient

$$\int_{\Delta_x} \omega L^p(x)dx = L^p (\cos b)\, L^p (\cos c),$$

ce qui est équivalent à (60).

4.4.4.2. Calculons maintenant l'intégrale

$$A^{pqr} = \int_{-1}^{+1} L^p(x)L^q(x)L^r(x)dx.$$

D'après (58) nous avons

$$xL^q(x) = \frac{q+1}{2q+1} L^{q+1}(x) + \frac{q}{2q+1} L^{q-1}(x). \tag{62}$$

en écrivant

$$L^r(x) = \frac{2r-1}{r} xL^{r-1}(x) - \frac{r-1}{r} L^{r-2}(x),$$

puis en utilisant (62), il vient la relation de récurrence

(63)
$$A^{pqr} = \frac{2r-1}{r} \frac{q+1}{2q+1} A^{p,q+1,r-1} + \frac{2r-1}{r} \frac{q}{2q+1} A^{p,q-1,r-1} - \frac{r-1}{r} A^{p,q,r-2}$$

Avec les conditions initiales

$$A^{pq0} = \frac{\delta^{pq}}{p+\frac{1}{2}},$$

la solution de (63) est :

$$\text{(64)} \quad \begin{cases} A^{pqr} = 0 \quad \text{si} \quad p+q+r = 2s+1 \quad s \text{ entier} \\ A^{pqr} = \dfrac{\Gamma(s+1)\Gamma\left(s-p+\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(s-q+\frac{1}{2}\right)\Gamma\left(s-r+\frac{1}{2}\right)}{\left[\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)\right]^2 \Gamma\left(s+\frac{3}{2}\right)\Gamma(s-p+1)\Gamma(s-q+1)\Gamma(s-r+1)} \\ \qquad\qquad \text{si } p+q+r = 2s \end{cases}$$

$\left[\text{On utilise ici la convention } \dfrac{1}{\Gamma(n)} = 0 \text{ pour } n \text{ entier} \leq 0\right]$.

La quantité A^{pqr} n'est donc non nulle que si

$$\text{(65)} \quad \begin{cases} p+q+r = 2s \quad s \text{ entier} \quad ; \quad s-p \geq 0 \quad ; \quad s-q \geq 0 \quad ; \quad s-r \geq 0 ; \\ \text{ces trois inégalités signifient que } p, q, r \text{ sont les trois cotés d'un} \\ \text{triangle.} \end{cases}$$

On peut aussi écrire (64) sous la forme :

$$\text{(66)} \quad \begin{cases} A^{pqr} = 2\left[\dfrac{s!}{(s-p)!(s-q)!(s-r)!}\right]^2 \dfrac{(2s-2p)!(2s-2q)!(2s-2r)!}{(2s+1)!} \\ \text{si les conditions (107) sont satisfaites.} \\ A^{pqr} = 0 \quad \text{dans le cas contraire.} \end{cases}$$

Ce résultat est donné dans [*42*], p. 87 ; la démonstration que nous donnons

ici semble plus simple que celle de Hobson. Le même résultat est écrit par Landau et Lifchitz [*43*], p. 482, sous la forme :

$$A^{pqr} = 2\begin{pmatrix} p & q & r \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2$$

où le symbole $\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$, nul sauf si $m_1 + m_2 + m_3 = 0$, est le « symbole $3j$ » de Wigner, lié aux coefficients d'addition vectorielle de Clebsch Gordan par la relation

$$C^{jm}_{j_1 m_1 j_2 m_2} = (-1)^{j_1 - j_2 + m}\sqrt{2j+1}\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \quad , \quad m_1 + m_2 = m$$

Nous pouvons alors écrire la décomposition du polynôme $L^p(x)L^q(x)$ sur la base $L^r(x)$:

$$L^p(x)L^q(x) = \sum_r a_r^{pq} L^r(x) \tag{67}$$

avec

$$a_r^{pq} = \left(r + \frac{1}{2}\right)A^{pqr} = \left[\sqrt{2r+1}\begin{pmatrix} p & q & r \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}\right]^2 = \left[C^{r0}_{0p\,0q}\right]^2 \tag{68}$$

4.4.4.3. Le produit scalaire du polynôme $L^p(x)L^q(y)L^r(z)$ par le polynôme $L^{p'}(x)L^{q'}(y)L^{r'}(z)$, relativement au noyau ω et au domaine Δ est obtenu en appliquant (60) et (67) :

$$\begin{aligned} L^{pqr}_{p'q'r'} &= \int_\Delta \omega L^p(x)L^q(y)L^r(z)L^{p'}(x)L^{q'}(y)L^{r'}(z)dxdydz \\ &= \sum_i a_i^{rr'}\left[\int_{-1}^{+1} L^p(x)L^{p'}(x)L^i(x)dx\right]\left[\int_{-1}^{+1} L^q(y)L^{q'}(y)L^i(y)dy\right] \end{aligned}$$

soit

$$L^{pqr}_{p'q'r'} = \sum_i \left(i + \frac{1}{2}\right)A^{pq'i}A^{qq'i}A^{rr'i} \tag{69}$$

Les seuls termes non nuls de la somme sont ceux pour lesquels i vérifie simultanément les inégalités

$$|p-p'| \leq i \leq p+p' \;;\; |q-q'| \leq i \leq q+q' \;;\; |r-r'| \leq i \leq r+r' \;;$$

et les conditions :

$$p + p' \quad , \quad q + q' \quad , \quad r + r' \quad , \quad i \tag{70}$$

de même parité. En particulier $L^{pqr}_{p'q'r'}$ est nul si $p + p'$, $q + q'$, $r + r'$ ne sont pas tous les 3 de même parité.

L'ensemble des polynômes $L^p(x)L^q(y)L^r(z)$, p, q, r, prenant toutes les valeurs entières positives ou nulles, forme une base de l'espace vectoriel des polynômes à trois variables. Nous allons, à partir de cette base, construire une base orthogonale pour le produit scalaire :

$$\langle f, g \rangle = \int_\Delta \omega f g dx dy dz. \tag{71}$$

Pour simplifier les notations nous écrirons désormais X_p pour $L^p(x)$, Y_q pour $L^q(y)$, Z_r pour $L^r(z)$.

Ordonnons l'ensemble des polynômes $X_pY_qZ_r$ par la relation :

$$X_pY_qZ_r > X_{p'}Y_{q'}Z_{r'}$$

si l'une des conditions suivantes est satisfaite :

$$p + q + r > p' + q' + r'$$

ou : $p + q + r = p' + q' + r'$ et $p > p'$

ou : $p = p'$ et $q + r = q' + r'$ et $q > q'$

On peut alors procéder à la construction de la base cherchée, par le procédé d'orthogonalisation de Schmidt.

Les calculs sont simplifiés par le fait que l'on peut, grâce à la condition (70), subdiviser l'espace vectoriel engendré par E en quatre sous-espaces vectoriels orthogonaux deux à deux pour le produit scalaire défini par (71) :

Pour un polynôme $X_pY_qZ_r$, définissons un indice de parité $(\alpha\beta\gamma)$, formé de trois chiffres qui sont les valeurs respectives de p, q, r modulo 2.

Les quatre sous-ensembles sont formés respectivement :

— le premier, des polynômes d'indice (000) et (111),
— le second, des polynômes d'indice (100) et (011),
— le troisième, des polynômes d'indice (010) et 101),
— le quatrième, des polynômes d'indice (001) et (110).

Il suffit alors d'orthogonaliser séparément les deux premiers sous-espaces, les troisième et quatrième se déduisant du second par permutation des lettes X, Y, Z.

Chacun des polynômes X_p prend la valeur 1 lorsque $x = 1$. Nous imposerons comme condition de normalisation que les polynômes de la base orthogonale prennent aussi la valeur 1 pour $x = y = z = 1$ (c'est-à-dire pour $X_p = Y_q = Z_r = 1$ pour tous p, q, r). Il est alors relativement aisé de construire les premiers polynômes de la base, notés P_{ijk}, en utilisant les formules (113) et (108).

Nous donnons ci-dessous la liste des polynômes de degré total inférieur ou égal à 4, pour les deux premiers sous-espaces :

sous-espace E_1 : (000) et (111)

$$
(72)\quad \begin{cases}
P_{000} = 1 & N_{000} = 2 \\
P_{200} = X_2 & N_{200} = \frac{4}{5} \\
P_{020} = Y_2 & N_{020} = \frac{4}{5} \\
P_{002} = Z_2 & N_{002} = \frac{4}{5} \\
P_{111} = \frac{1}{2}\{9X_1Y_1Z_1 - 2X_2 - 2Y_2 - 2Z_2 - 1\} & N_{111} = \frac{14}{25} \\
P_{220} = \frac{1}{18}\{35X_2Y_2 - 45X_1Y_1Z_1 + 3X_2 + 10Y_2 + 10Z_2 + 5\} & N_{220} = \frac{14}{45}
\end{cases}
$$

P_{022} et P_{202} se déduisent de P_{220} par permutation sur X, Y, Z.

sous-espace E_2 : (100) et (011)

$$
(73)\quad \begin{cases}
P_{100} = X_1 & N_{100} = \frac{4}{3} \\
P_{011} = \frac{1}{2}(3Y_1Z_1 - X_1) & N_{011} = \frac{2}{3} \\
P_{300} = X_3 & N_{300} = \frac{4}{7} \\
P_{120} = \frac{1}{3}(5X_1Y_2 - 3Y_1Z_1 + X_1) & N_{120} = \frac{4}{9} \\
P_{102} = \frac{1}{3}(5X_1Z_2 - 3Y_1Z_1 + X_1) & N_{102} = \frac{4}{9} \\
P_{211} = \frac{1}{4}(25X_2Y_1Z_1 - 10X_1Y_2 - 10X_1Z_2 - 5X_3 + 11Y_1Z_1 - 7X_1) & N_{211} = \frac{27}{56}
\end{cases}
$$

La quantité N_{ijk}, donnée dans la deuxième colonne, représente le carré de la norme de P_{ijk}, soit :

$$
(74)\qquad N_{ijk} = \int_\Delta \omega P_{ijk} P_{ijk} dx dy dz.
$$

Lors de la construction du tableau précédent, différentes propriétés

apparaissent : les polynômes P_{i00} construits sont les polynômes X_i. Les polynômes P_{i10} vérifient, aussi loin que l'on pousse leur construction, la relation : $(n+1)P_{n10} = (2n+1)X_nY_1 - nP_{n-1,0,1}$. La relation d'ordre entre polynômes de même degré global ne joue aucun rôle, le degré de $P_{\alpha\beta\gamma}$ est $\alpha+\beta+\gamma$ et il n'y a dans $P_{\alpha\beta\gamma}$ qu'un seul monôme de ce degré, proportionnel à $X_\alpha Y_\beta Z_\gamma$.

Nous vérifions aussi, sur tous les exemples de (72) et (73) et en utilisant la formule (60), les relations suivantes :

$$(75)\qquad \int_{\Delta_x} \omega P_{ijk}dx = Y_{i+j}Z_{i+k} \quad ; \quad \int_{\Delta_y} \omega P_{ijk}dy = X_{i+j}Z_{j+k}\,; \qquad \int_{\Delta_z} \omega P_{ijk}dz = X_{i+k}Y_{j+k}.$$

Mais tous nos efforts, pour démontrer directement ces dernières formules à partir de la construction même de la suite des P_{ijk} n'ont pas encore abouti. Aussi avons-nous cherché à obtenir d'autres relations permettant de définir les polynômes P_{ijk}. Nous partons de la relation (67), et nous constatons, sur les tableaux (72) et (73) et leurs prolongements, que l'on peut vérifier la relation :

$$(76)\qquad X_pY_q = \sum_i a^{pq}_{p+q-2i}P_{p-i,q-i,i}$$

aussi loin que l'on pousse le calcul.

Si nous utilisons (76) comme définition de P_{pq0}, en supposant connus les autres $P_{p-i,q-i,i}$ de degré inférieur à $p+q$, et en nous souvenant que a^{pq}_r est nul sauf si $|p-q| < r < p+q$, nous pouvons alors démontrer très aisément, pour cette famille de polynômes, les relations (75). Nous utilisons pour cela (67) et la relation qui s'en déduit immédiatement en faisant $x = 1$, soit

$$\sum_r a^{pq}_r = 1.$$

Nous sommes alors conduits, pour trouver une relation générale entre les polynômes P_{pqr}, à procéder de la façon suivante : plaçons-nous dans l'un des sous-espaces vectoriels considérés plus haut, par exemple le premier : la relation

$$(77)\qquad X_\alpha Y_\beta Z_\gamma = \sum_{i,j,k} a^{\alpha}_{\alpha+\beta-2k}a^{\alpha}_{\alpha+\gamma-2j}a^{\beta}_{\beta+\gamma-2i}Q_{\alpha+i-j-k,\beta-i+j-k,\gamma-i-j+k}$$

permet, en l'appliquant avec $\alpha = \beta = \gamma = 0$, avec $\alpha = 2$, $\beta = 0$, $\gamma = 0$, avec $\alpha = 0$, $\beta = 2$, $\gamma = 0$, avec $\alpha = 0$, $\beta = 0$, $\gamma = 2$, de construire successivement des polynomes Q_{000}, Q_{200}, Q_{020}, Q_{002}, qui coïncident respectivement avec les polynômes P de même ensemble d'indice. Mais, si on applique la formule (77) lorsqu'aucun des 3 indices α, β, γ n'est nul, il apparaît dans le membre de droite, des termes $Q_{\lambda\mu\nu}$ tels que l'un des indices puisse être négatif : on a toujours

$$\lambda+\mu=\alpha+\beta-2k\geq 0 \ , \ \lambda+\nu=\alpha+\gamma-2j\geq 0 \ , \ \mu+\nu=\beta+\gamma-2i\geq 0,$$

mais le plus petit des indices peut prendre une valeur négative, supérieure ou égale à l'opposée de la plus petite des valeurs α, β, γ. La formule (77) ne permet donc pas, pour α, β, γ strictement positifs, d'obtenir $Q_{\alpha\beta\gamma}$ sans ambiguïté, puisque en même temps que $Q_{\alpha\beta\gamma}$ s'introduisent de nouvelles quantités à indice négatif. Nous lèverons cette ambiguïté en imposant aux quantités $Q_{\alpha\beta\gamma}$ ayant un indice négatif des relations supplémentaires.

Nous supposerons $a \geq b \geq 0$, $c < 0$ et nous écrirons :

$$(78) \quad Q_{abc} = Q_{a+1,b-1,c+1} + Q_{a-1,b+1,c+1} + Q_{a-1,b-1,c+1} - Q_{a,b,c+2} - Q_{a-2,b,c+2} - Q_{a,b-2,c+2} + Q_{a-1,b-1,c+3}.$$

Cette relation, éventuellement appliquée plusieurs fois, permet d'éliminer les expressions $Q_{\alpha\beta\gamma}$ ayant un indice négatif.

La relation (77) peut s'écrire maintenant :

$$(79) \qquad X_\alpha Y_\beta Z_\gamma = \sum M^{ijk}_{\alpha\beta\gamma} Q_{\alpha+i-j-k,\beta+j-i-k,\gamma+k-i-j}$$

la sommation étant limitée aux valeurs de i, j, k telles que

$$\alpha+i-j-k\geq 0 \quad , \quad \beta+j-i-k\geq 0 \quad , \quad \gamma+k-i-j\geq 0,$$

et les $M^{ijk}_{\alpha\beta\gamma}$ étant des combinaisons linéaires des coefficients de (77). Il est alors immédiat de montrer que cette relation définit $Q_{\alpha\beta\gamma}$ comme un polynôme dont le terme de plus haut degré est proportionnel à $X_\alpha Y_\beta Z_\gamma$; cette construction se répète évidemment avec les mêmes formules (77) à (79) dans les trois autres sous-espaces vectoriels.

D'autre part, il est facile de démontrer par récurrence que $Q_{\alpha\beta\gamma}$ vérifie les propriétés (75) : la forme des relations (77) et (78) a justement été choisie dans ce but. Le seul problème est alors celui de l'identification des polynômes $P_{\alpha\beta\gamma}$ et $Q_{\alpha\beta\gamma}$. Par vérification directe, l'identification est aisée pour les premières valeurs de α, β, γ. Par contre, pour la démonstration générale, qui consiste à prouver que les polynômes $Q_{\alpha\beta\gamma}$ et $Q_{\alpha'\beta'\gamma'}$, construits à partir

de (79), sont orthogonaux, nous n'avons pu trouver qu'une démonstration par récurrence, d'une lourdeur et d'un volume rédhibitoires.

Il existe très certainement une explication à la simplicité des relations (75), de même qu'il existe certainement une explication au fait que les polynômes $P_{\alpha\beta\gamma}$ apparaissent, les premiers d'entre eux au moins, dans le problème d'intégration de tenseurs du chapitre 3, mais nous n'avons pour l'instant, pas tiré tout cela complètement au clair. La réponse à ces questions n'influe d'ailleurs pas sur les résultats de ce travail, et nous les reprendrons par ailleurs.

Les seules propriétés des polynomes $P_{\alpha\beta\gamma}$ que nous utiliserons dans la suite sont la propriété d'orthogonalité, les propriétés (75) et les valeurs numériques des premiers polynômes et de leurs normes, consignées dans les formules (72) et (73).

4.5. Détermination des coefficients de transport.

4.5.1. Les modèles M_1 et M_1^*. — Nous allons maintenant, en nous appuyant sur des exemples, montrer comment les notions développées précédemment permettent une résolution approchée des équations intégrales et une détermination des valeurs des coefficients de transport. Parmi les divers cas décrits dans les paragraphes précédents, nous allons choisir deux exemples, qui mettent en lumière les différents aspects de la méthode :

— le premier sera celui des molécules rigides, à zone d'action sphérique de rayon invariable, dont le centre d'inertie G n'est pas confondu avec le centre 0 de la zone d'action et dont le tenseur d'inertie central n'est pas de révolution autour de G0. Les formules qui s'appliquent à ce modèle sont les formules (1) à (12). Il existe des chocs inverses : ces chocs ont été étudiés en 1.10 : la détermination de l'état des vitesses après le choc en fonction de l'état des vitesses avant le choc est facile à partir des formules du chapitre premier (voir aussi [*26*]). Nous noterons ce modèle M_1 ;

— le second sera un modèle de molécule de révolution, à un degré de vibration harmonique, parallèlement à l'axe de révolution, et à collisions pseudo-inverses : on peut représenter une telle molécule par deux demi-sphères de rayon fixe, reliées par un cylindre de même rayon et de longueur variable ; le choc de deux molécules est alors représenté par le choc parfait de deux telles figures ; on a 3 types de chocs possibles : demi-sphère contre demi-sphère, demi-sphère contre cylindre, et cylindre contre cylindre. Dans chaque cas la détermination de l'état des vitesses après le choc en

fonction de l'état avant le choc est aisée. Les hypothèses sur la molécule étant celles de 4.2.2 et 4.2.3, les équations en cause sont les équations (38) à (47). De plus, l'hypothèse $\mathscr{H}^*$, nécessaire pour qu'il existe des chocs pseudo-inverses, fait que les diverses quantités qui interviennent dans ces équations sont des fonctions paires de Λ et de l'ensemble des deux variables $\mu_1\mu_2$ (voir 4.3.2 et 4.3.3). Nous noterons ce modèle M_1^*.

4.5.2. Le choix des développements et le calcul de λ, μ, κ pour M_1. — Conformément aux notions exposées en 4.4, chacune des quantités A_i ($i = 1, 3$), B_j ($j = 1,6$), C doit être développée en série de produits de fonctions des variables W^2 ; Ω^2 ; φ ; μ_1 ; μ_2 ; μ_3. Pour φ et pour l'ensemble des variables μ_1, μ_2, μ_3, les familles de fonctions orthogonales ont été définies sans ambiguïté en 4.4.3 et 4.4.4. Il reste un certain arbitraire pour les fonctions en Ω^2 et W^2 : le choix de l'indice a qui fixe la famille de polynômes de Sonine utilisée (4.4.2). On choisira pour chacune des variables A_i, B_j, C cet indice a de façon à minimiser le nombre de coefficients qui interviennent dans la formulation des valeurs de λ, μ, κ, et dans l'écriture des conditions (4) à (6).

La présence dans (1) et (4) des noyaux respectifs $W^5\Omega^2 + W^3\Omega^4$ et $W^3\Omega^2$ nous conduit à choisir pour les variables A_i les développements en polynômes $S^1(W^2)$ et $S^{1/2}(\Omega^2)$.

De même, la présence dans (2) du noyau Ω^2W^4 nous incite à choisir pour les variables B_i, les polynômes $S^{3/2}(W^2)$ et $S^{1/2}(\Omega^2)$, alors que la présence de Ω^2W^4, $W^2\Omega^2$ et $W^2\Omega^4 + W^4\Omega^2$ dans (3), (5) et (6) nous amène à choisir pour C un développement en polynômes $S^{1/2}(W^2)$ et $S^{1/2}(\Omega^2)$.

Nous poserons donc :

$$A_i = \sum_{p,q,r,s,t,u} A_i^{pqrstu} S_p^1(W^2) S_p^{1/2}(\Omega^2) P_{rst}(\mu_1, \mu_2, \mu_3) F_u(\varphi) \quad (80)$$ [1]

$$B_j = \sum_{p,q,r,s,t,u} B_j^{pqrstu} S_p^{3/2}(W^2) S_q^{1/2}(\Omega^2) P_{rst}(\mu_1, \mu_2, \mu_3) F_u(\varphi) \quad (81)$$

[1] Nous utiliserons pour $F_u(\varphi)$ la définition $F_u(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos u\varphi$ pour $u > 0$,

$$F_u(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin u\varphi$$

pour $u < 0$, $F_0(\varphi) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$. L'indice u pourra donc prendre toutes les valeurs entières de $-\infty$ à $+\infty$, alors que les indices p, q, r, s, t, sont tous positifs ou nuls.

$$(82) \qquad C = \sum_{p,q,r,s,t,u} C^{pqrstu} S_p^{1/2}(W^2) S_q^{1/2}(\Omega^2) P_{rst}(\mu_1, \mu_2, \mu_3) F_u(\varphi)$$

Avec ces notations, et compte tenu des diverses conditions d'orthogonalité exprimées en 4.4, les quantités λ, μ, κ et les relations (4), (5) et (6) ne font intervenir qu'un petit nombre de coefficients.

Explicitons, par exemple, les calculs qui conduisent à la détermination de la valeur de λ.

On a, d'après (1) et (80) :

$$\lambda = \frac{4k^2T}{3m^2\pi^2}\rho \int_{\varepsilon^+} \omega(W^5\Omega^2 + W^3\Omega^4) e^{-W^2-\Omega^2} \left\{ \sum_{pqrstu} (A_1^{pqrstu} + \mu_1 A_2^{pqrstu} + \mu_2 A_3^{pqrstu}) \times S_p^1(W^2) S_q^{1/2}(\Omega^2) P_{rst}(\mu_1, \mu_2, \mu_3) F_u(\varphi) \right\} dW d\Omega d\mu d\varphi$$

L'intégration par rapport à φ ne laisse comme termes non nuls que ceux pour lesquels $u = 0$.

D'autre part, d'après (72) et (73)

$$\int A_1^{pqrst0} \omega d\mu_1 d\mu_2 d\mu_3 = 4\delta_{rst}^{000} A_1^{pqrst0} = 4A_1^{pq0000}$$

$$\int \mu_1 A_1^{pqrst0} \omega d\mu_1 d\mu_2 d\mu_3 = \frac{4}{3}\delta_{rst}^{100} A_2^{pqrst0} = \frac{4}{3} A_2^{pq1000}$$

$$\int \mu_2 A_2^{pqrst0} \omega d\mu_1 d\mu_2 d\mu_3 = \frac{4}{3}\delta_{rst}^{010} A_3^{pqrst0} = \frac{4}{3} A_3^{pq0100}$$

d'où

$$\lambda = \frac{4k^2T}{3m^2\pi^2}\frac{4}{3}\rho \int (W^5\Omega^2 + W^3\Omega^4) e^{-W^2-\Omega^2} \sum_{p,q} \{ (3A_1^{pq0000} + A_2^{pq1000} + A_3^{pq0100}) \times S_p^1(W^2) S_q^{1/2}(\Omega^2) \} dW d\Omega.$$

Enfin, utilisant (51) à (54), il vient :

$$\lambda = \frac{16k^2T}{9m^2\pi^2}\rho \sum_{p,q} \left\{ (3A_1^{pq0000} + A_2^{pq1000} + A_3^{pq0100}) \left((\delta_p^0 - \delta_p^1)\delta_q^0 \frac{\sqrt{\pi}}{4} + \delta_p^0(\delta_q^0 - \delta_q^1)\frac{3\sqrt{\pi}}{16} \right) \right.$$

soit :

$$\lambda = \frac{kT}{9m^2\pi^{3/2}}\rho \{ 21A_1^{000000} - 12A_1^{100000} - 9A_1^{010000} + 7A_2^{001000} - 4A_2^{101000} - 3A_2^{011000} + 7A_3^{000100} - 4A_3^{100100} - 3A_3^{010100} \}.$$

Quant à la condition (4), elle s'écrit :

$$\sum_{p,q} \delta_p^0 \delta_q^0 (3A_1^{pq0000} + A_2^{pq1000} + A_3^{pq0100}) = 0$$

soit :

$$3A_1^{000000} + A_2^{001000} + A_3^{000100} = 0 \tag{83}$$

ce qui permet de simplifier l'expression de λ dont la forme définitive est :

$$\lambda = -\frac{k^2T}{9m^2\pi^{3/2}}\rho\{12A_1^{100000} + 9A_1^{010000} + 4A_2^{101000} + 3A_2^{011000} + 4A_3^{100100} + 3A_3^{010100}\} \tag{84}$$

Des calculs identiques sur les variables B_j et C conduisent aux résultats suivants :

$$\mu = \frac{kT\rho}{10\pi m}\left\{B_1^{000000} + \frac{1}{5}B_2^{002000} + \frac{1}{5}B_3^{00200} + \frac{1}{3}B_4^{001000} + \frac{1}{6}B_5^{001100} + \frac{1}{3}B_6^{000100}\right\} \tag{85}$$

$$\kappa = \frac{kT\rho}{2m\pi}(C^{000000} - C^{100000}) \tag{86}$$

avec les conditions, tirées de (6) et (5) :

$$2C^{000000} - C^{100000} - C^{010000} = 0 \tag{87}$$

$$\sum_{i \leq \inf(a,b)} C^{00i,a-i,b-i,c} = 0 \qquad \text{quels que soient } a, b, c. \tag{88}$$

L'égalité (88) a été établie en utilisant les relations (75) et le fait que l'ensemble des polynômes $L^p(x)L^q(y)$ (p, q entiers positifs ou nuls), forme une base orthogonale de l'ensemble des polynômes à deux variables.

De (88) on tire, pour $a = b = c = 0$, $C^{000000} = 0$, ce qui permet d'écrire κ sous la forme :

$$\kappa = -\frac{kT\rho}{2m\pi}C^{100000} = \frac{kT\rho}{2m\pi}C^{010000}. \tag{89}$$

4.5.3. La résolution des équations intégrales pour le modèle M_1. — Explicitons la méthode sur l'exemple de l'équation (9) :

$$I(A) = f^0 W(W^2 + \Omega^2 - 4). \tag{9}$$

Nous avons défini en 3.3.3 la quantité $[\mathbf{R}, \mathbf{S}]$ où $\mathbf{R}$ et $\mathbf{S}$ sont deux vecteurs, par

$$[\mathbf{R}, \mathbf{S}] = \frac{1}{m} \int \mathbf{R} \cdot \mathrm{I}(\mathbf{S}) d\boldsymbol{p}_x d\boldsymbol{p}_a d\boldsymbol{a}$$

En passant aux variables W, Ω, μ_1, μ_2, μ_3, φ nous avons :

$$(90) \quad [\mathbf{R}, \mathbf{S}] = \frac{1}{8m\pi^6} \int e^{-\mathrm{W}^2 - \Omega^2 - \mathrm{W}_1^2 - \Omega_1^2} (\mathbf{R} + \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}' - \mathbf{R}'_1) \mathbf{S} \mathrm{Y}(-g) d\boldsymbol{\sigma} d\mathrm{W} d\Omega d\mu_1 d\mu_2 d\mu_3 d\varphi d\mathrm{W}_1 d\Omega_1 d\mu_1^1 d\mu_2^1 d\mu_3^1 d\varphi_1$$

($\boldsymbol{\sigma}$ représente ici l'ensemble des paramètres qui déterminent la position relative des deux molécules).

Multiplions les deux membres de (9) par le scalaire

$$\mathrm{S}_{p'}^1(\mathrm{W}^2) \mathrm{S}_{q'}^{1/2}(\Omega^2) \mathrm{P}_{r's't'}(\mu_1 \mu_2 \mu_3) \mathrm{F}_{u'}(\varphi)$$

puis multiplions scalairement les deux vecteurs ainsi obtenus successivement par les vecteurs $\boldsymbol{i}$, $\boldsymbol{j}$, $\boldsymbol{k}$, et intégrons sur le domaine ε^+.

Définissons la notation $(\alpha\beta)_{p\,q\,r\,s\,t\,u}^{p'q'r's't'u'}$ par :

$$(\alpha\beta)_{p\,q\,r\,s\,t\,u}^{p'q'r's't'u'} = [\boldsymbol{\alpha} \mathrm{S}_{p'}^1(\mathrm{W}^2) \mathrm{S}_{q'}^{1/2}(\Omega^2) \mathrm{P}_{r's't'}(\mu_1 \mu_2 \mu_3) \mathrm{F}_u(\varphi), \boldsymbol{\beta} \mathrm{S}_p^1(\mathrm{W}^2) \mathrm{S}_q^{1/2}(\Omega^2) \mathrm{P}_{rst}(\mu_1 \mu_2 \mu_3) \mathrm{F}_u(\varphi)]$$

Avec le multiplicateur $\boldsymbol{i}$ le premier membre s'écrit :

$$(91) \quad \sum_{pqrstu} (\mathrm{A}_1^{pqrstu} (ii)_{p\,q\,r\,s\,t\,u}^{p'q'r's't'u'} + \mathrm{A}_2^{pqrstu} (ij)_{p\,q\,r\,s\,t\,u}^{p'q'r's't'u'} + \mathrm{A}_3^{pqrstu} (ik)_{p\,q\,r\,s\,t\,u}^{p'q'r's't'u'})$$

quant au second membre, il s'écrit :

$$(92) \quad \frac{\rho}{2\pi^3} \int e^{-\mathrm{W}^2 - \Omega^2} (\mathrm{W}^2 + \Omega^2 - 4) \mathbf{W} \cdot \boldsymbol{i} \mathrm{W}^2 \Omega^2 \omega \mathrm{S}_{p'}^1(\mathrm{W}^2) \mathrm{S}_{q'}^{1/2}(\Omega^2) \mathrm{P}_{r's't'}(\mu_1 \mu_2 \mu_3) \mathrm{F}_{u'}(\varphi) \times d\mathrm{W} d\Omega d\mu_1 d\mu_2 d\mu_3 d\varphi$$

ou, encore, d'après (51) à (54) :

$$-\frac{\rho}{8\pi^{3/2}} (\delta_{p'}^0 \delta_{q'}^0 + 4\delta_{p'}^1 \delta_{q'}^0 + 3\delta_{p'}^0 \delta_{q'}^1) \delta_{r'}^0 \delta_{s'}^0 \delta_{t'}^0 \delta_{u'}^0$$

Les premiers membres correspondant aux multiplicateurs $\boldsymbol{j}$ et $\boldsymbol{k}$ s'obtiennent immédiatement à partir de (91) en remplaçant dans les scalaires $(ii)_{\cdots}^{\cdots}$ $(ij)_{\cdots}^{\cdots}$ $(ik)_{\cdots}^{\cdots}$ l'indice i placé en première position successivement

par j puis par k. Quant aux seconds membres, ils seront obtenus en remplaçant dans (92) le terme $\mathbf{W}\cdot\boldsymbol{i} = \mathrm{W}$ par $\mathbf{W}\cdot\boldsymbol{j} = \mu_1\mathrm{W}$ puis par $\mathbf{W}\cdot\boldsymbol{k} = \mu_2\mathrm{W}$.

Nous obtenons ainsi le système d'équations (93) où nous avons symbolisé par I l'ensemble des indices p, q, r, s, t, u et par I′ l'ensemble des indices $p'q'r's't'u'$.

$$
(93)\quad \left\{
\begin{aligned}
\sum_{\mathrm{I}} (\mathrm{A}_1^{\mathrm{I}}(ii)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} + \mathrm{A}_2^{\mathrm{I}}(ij)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} + \mathrm{A}_3^{\mathrm{I}}(ik)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'}) &= -\frac{\rho}{8\pi^{3/2}}(\delta_{p'}^0\delta_{q'}^0 + 4\delta_{p'}^1\delta_{q'}^0 \\
&\qquad + 3\delta_{p'}^0\delta_{q'}^1)\delta_{r'}^0\delta_{s'}^0\delta_{t'}^0\delta_{u'}^0 \\
\sum_{\mathrm{I}} (\mathrm{A}_1^{\mathrm{I}}(ji)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} + \mathrm{A}_2^{\mathrm{I}}(jj)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} + \mathrm{A}_3^{\mathrm{I}}(jk)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'}) &= \frac{\rho}{24\pi^{3/2}}(\delta_{p'}^0\delta_{q'}^0 + 4\delta_{p'}^1\delta_{q'}^0 \\
&\qquad + 3\delta_{p'}^0\delta_{q'}^1)\delta_{r'}^1\delta_{s'}^0\delta_{t'}^0\delta_{u'}^0 \\
\sum_{\mathrm{I}} (\mathrm{A}_1^{\mathrm{I}}(ki)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} + \mathrm{A}_2^{\mathrm{I}}(kj)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} + \mathrm{A}_3^{\mathrm{I}}(kk)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'}) &= -\frac{\rho}{24\pi^{3/2}}(\delta_{p'}^0\delta_{q'}^0 + 4\delta_{p'}^1\delta_{q'}^0 \\
&\qquad + 3\delta_{p'}^0\delta_{q'}^1)\delta_{r'}^0\delta_{s'}^1\delta_{t'}^0\delta_{u'}^0
\end{aligned}
\right.
$$

Nous obtenons de la même façon un système d'équations linéaires pour les coefficients B_i^{pqrstu}, en multipliant les deux membres de (10) par le scalaire $\mathrm{S}_{p'}^{3/2}(\mathrm{W}^2)\mathrm{S}_{q'}^{1/2}(\Omega^2)\mathrm{P}_{r's't'}(\mu_1\mu_2\mu_3)\mathrm{F}_{u'}(\varphi)$, puis successivement par les tenseurs $\mathbf{t}_1 = \boldsymbol{i}^0\boldsymbol{i}$, $\mathbf{t}_2 = \boldsymbol{j}^0\boldsymbol{j}$, $\mathbf{t}_3 = \boldsymbol{k}^0\boldsymbol{k}$, $\mathbf{t}_4 = \boldsymbol{i}^0\boldsymbol{j}$, $\mathbf{t}_5 = \boldsymbol{j}^0\boldsymbol{k}$, $\mathbf{t}_6 = \boldsymbol{k}^0\boldsymbol{i}$.

Définissant alors

$$
\binom{\alpha}{\beta}_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} = \binom{\alpha}{\beta}_{p\,q\,r\,s\,t\,u}^{p'q'r's't'u'} = [\mathbf{t}_\alpha \mathrm{S}_{p'}^{3/2}(\mathrm{W}^2)\mathrm{S}_{q'}^{1/2}(\Omega^2)\mathrm{P}_{r's't'}(\mu_1\mu_2\mu_3)\mathrm{F}_{u'}(\varphi),
\mathbf{t}_\beta \mathrm{S}_p^{3/2}(\mathrm{W}^2)\mathrm{S}_q^{1/2}(\Omega^2)\mathrm{P}_{rst}(\mu_1\mu_2\mu_3)\mathrm{F}_u(\varphi)]
$$

nous pouvons écrire le premier membre de l'équation correspondant au multiplicateur $\mathbf{t}_\alpha$ sous la forme :

$$
\sum_{\beta=1,6}\sum_{\mathrm{I}} \mathrm{B}_\beta^{\mathrm{I}}\binom{\alpha}{\beta}_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} ;
$$

quant au second membre, il prend la forme :

$$
\frac{\rho}{\pi^3}\int e^{-\mathrm{W}^2-\Omega^2}\mathbf{t}_\alpha : (\mathbf{W}^0\mathbf{W})\mathrm{W}^2\Omega^2\omega\mathrm{S}_{p'}^{3/2}(\mathrm{W}^2)\mathrm{S}_{q'}^{1/2}(\Omega^2)\mathrm{P}_{r's't'}(\mu_1\mu_2\mu_3)\mathrm{F}_{u'}(\varphi)
\,d\mathrm{W}d\Omega d\mu_1 d\mu_2 d\mu_3 d\varphi
$$

soit :

$$
\frac{3\rho}{32\pi^2}\delta_{p'}\delta_{q'}\delta_{u'}\int \omega(\mathbf{t}_\alpha : \mathbf{t}_1)\mathrm{P}_{r's't'}d\mu_1 d\mu_2 d\mu_3
$$

or, nous avons :

$$\begin{cases} \mathbf{t}_1 : \mathbf{t}_1 = \dfrac{2}{3} P_{000} \\ \mathbf{t}_2 : \mathbf{t}_1 = \dfrac{2}{3} P_{200} \\ \mathbf{t}_2 : \mathbf{t}_1 = \dfrac{2}{3} P_{020} \end{cases} \qquad \begin{cases} \mathbf{t}_4 : \mathbf{t}_1 = \dfrac{2}{3} P_{100} \\ \mathbf{t}_5 : \mathbf{t}_1 = \dfrac{2}{3} P_{110} \\ \mathbf{t}_6 : \mathbf{t}_1 = \dfrac{2}{3} P_{010} \end{cases}$$

d'où le système d'équations :

$$(94) \qquad \begin{cases} \displaystyle\sum_{\beta=1,6} \sum_{\mathrm{I}} B^{\mathrm{I}}_{\beta} \binom{1}{\beta}^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{I}} = \frac{\rho}{4\pi^2} \delta^0_{p'} \delta^0_{q'} \delta^0_{r'} \delta^0_{s'} \delta^0_{t'} \delta^0_{u'} \\ \displaystyle\sum_{\beta=1,6} \sum_{\mathrm{I}} B^{\mathrm{I}}_{\beta} \binom{2}{\beta}^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{I}} = \frac{\rho}{20\pi^2} \delta^0_{p'} \delta^0_{q'} \delta^2_{r'} \delta^0_{s'} \delta^0_{t'} \delta^0_{u'} \\ \displaystyle\sum_{\beta=1,6} \sum_{\mathrm{I}} B^{\mathrm{I}}_{\beta} \binom{3}{\beta}^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{I}} = \frac{\rho}{20\pi^2} \delta^0_{p'} \delta^0_{q'} \delta^0_{r'} \delta^2_{s'} \delta^0_{t'} \delta^0_{u'} \\ \displaystyle\sum_{\beta=1,6} \sum_{\mathrm{I}} B^{\mathrm{I}}_{\beta} \binom{4}{\beta}^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{I}} = \frac{\rho}{12\pi^2} \delta^0_{p'} \delta^0_{q'} \delta^1_{r'} \delta^0_{s'} \delta^0_{t'} \delta^0_{u'} \\ \displaystyle\sum_{\beta=1,6} \sum_{\mathrm{I}} B^{\mathrm{I}}_{\beta} \binom{5}{\beta}^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{I}} = \frac{\rho}{24\pi^2} \delta^0_{p'} \delta^0_{q'} \delta^1_{r'} \delta^1_{s'} \delta^0_{t'} \delta^0_{u'} \\ \displaystyle\sum_{\beta=1,6} \sum_{\mathrm{I}} B^{\mathrm{I}}_{\beta} \binom{6}{\beta}^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{I}} = \frac{\rho}{12\pi^2} \delta^0_{p'} \delta^0_{q'} \delta^0_{r'} \delta^1_{s'} \delta^0_{t'} \delta^0_{u'} \end{cases}$$

Enfin, pour calculer le coefficient C, nous multiplions les deux membres de (11) par le scalaire : $S^{1/2}_p(W^2) S^{1/2}_q(\Omega^2) P_{rst}(\mu_1\mu_2\mu_3) F_u(\varphi)$ et nous intégrons sur ε^+. En posant

$$(\gamma)^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{I}} = (\gamma)^{p'q'r's't'u'}_{p\,q\,r\,s\,t\,u} = [S^{1/2}_{p'}(W^2) S^{1/2}_{q'}(\Omega^2) P_{r's't'}(\mu_1\mu_2\mu_3) F_{u'}(\varphi), \\ S^{1/2}_p(W^2) S^{1/2}_q(W^2) P_{rst}(\mu_1\mu_2\mu_3) F_u(\varphi)]$$

il vient le système d'équations :

$$(95) \qquad \sum_{\mathrm{I}} (\gamma)^{\mathrm{I}'}_{\mathrm{I}} C^{\mathrm{I}} = \frac{\rho}{16\pi^2} (\delta^0_{p'} \delta^1_{q'} - \delta^1_{p'} \delta^0_{q'}).$$

Nous n'avons pas pour l'instant, dans les systèmes (93), (94) et (95), précisé les valeurs prises par les ensembles d'indices I et I'. C'est ce que nous allons faire maintenant. Lorsque nous remplaçons le noyau de l'une des équations intégrales par une somme *finie* de noyaux dégénérés, nous

obtenons pour chacune des fonctions en cause un ensemble de N coefficients indéterminés (par exemple pour $\mathbf{A}^{\mathrm{I}}$: N est égal à trois fois le nombre d'éléments de I). Pour déterminer ces coefficients il faudra obtenir N équations linéaires indépendantes. Ces équations indépendantes sont obtenues en projetant l'équation intégrale sur des fonctions formant une base orthogonale. Ces fonctions peuvent être choisies de façon quelconque dans la base, pourvu qu'elles soient au nombre de N. La méthode la plus naturelle consiste cependant à choisir celles qui ont servi à définir la somme finie de noyaux dégénérés. Ceci revient donc à choisir pour ensemble de variation de I′ le même que pour I, que nous notons $\mathscr{A}$.

Lorsque l'on considère une suite $\mathscr{A}_1, \ldots, \mathscr{A}_n, \ldots$, ordonnée par inclusion ($\mathscr{A}_{n-1} \subset \mathscr{A}_n$), on obtient, pour chaque fonction inconnue A, $\mathbf{B}$, C, une suite d'approximations $\mathbf{A}_n$, $\mathbf{B}_n$, C_n.

Lorsque l'équation intégrale de Fredholm $\mathrm{I}(x) = a$ est à *noyau symétrique*, ce qui est le cas pour le modèle M_1, on peut montrer [*44*] que $\mathscr{A}_p \supset \mathscr{A}_q$ entraîne $[x_p, \mathrm{A}_p] \geq [\mathrm{A}_q, x_q] > 0$.

Donc, les approximations successives λ_n, μ_n, κ_n forment des suites qui convergent respectivement vers λ, μ, κ en étant monotones croissantes. La détermination des approximations correspondant à une troncature $\mathscr{A}_n$ nécessite le calcul des quantités

$$(\alpha, \beta)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} \quad , \quad \binom{\alpha}{\beta}_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} \quad , \quad (\gamma)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} \quad \text{avec} \quad \mathrm{I}, \mathrm{I}' \in \mathscr{A}_n.$$

Ces quantités sont des intégrales définies par (90).

En utilisant la symétrie et les résultats de 3.5 nous obtenons

$$(\alpha, \beta)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} = (\beta, \alpha)_{\mathrm{I}'}^{\mathrm{I}} \quad , \quad \binom{\alpha}{\beta}_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'} = \binom{\beta}{\alpha}_{\mathrm{I}'}^{\mathrm{I}} \quad \text{et} \quad (\gamma)_{\mathrm{I}'}^{\mathrm{I}} = (\gamma)_{\mathrm{I}}^{\mathrm{I}'},$$

ce qui réduit le nombre des intégrales à calculer.

Le calcul effectif de ces diverses quantités ne soulève aucune difficulté théorique : les équations du choc permettent d'exprimer les quantités Ω', W', μ'_1, μ'_2, μ'_3, φ' ; Ω'_1, W'_1, $\mu_1^{1'}$, $\mu_2^{1'}$, $\mu_3^{1'}$, φ'_1 en fonction des quantités correspondantes non primées et des paramètres qui fixent la position des molécules l'une par rapport à l'autre. L'intégration n'est alors plus qu'un calcul numérique, fastidieux, mais sans problème. Il n'est d'ailleurs pas envisageable de le réaliser explicitement « à la main », sauf dans des cas particulièrement simplifiés (cf. [*30*]).

4.5.4. Méthodes d'étude du modèle M_1^*. — Nous n'allons pas, pour ce modèle, reprendre tous les calculs des numéros précédents, mais simplement insister sur les différences qui apparaissent dans le traitement des modèles M_1 et M_1^*.

— L'existence de variables supplémentaires, Λ et L, se traduit par la présence, dans les développements, de polynômes en Λ et de polynômes en L, orthogonaux par rapport aux noyaux respectifs $e^{-\Lambda^2}$ et e^{-L^2}, sur le domaine $]-\infty, +\infty[$. Conformément aux conclusions de 4.4 et compte tenu de la parité de toutes les fonctions utilisées par rapport à Λ, nous introduisons les familles de polynômes $S_v^{1/2}(\Lambda^2)$ et $H_w(L)$.

— La variable μ_3 n'intervient plus comme variable d'intégration, et sa valeur reste nulle. Il est possible de construire, à partir des polynômes $P_{pqr}(x, y, z)$, une famille de polynômes R_{pq}, orthogonaux par rapport au noyau $\omega_1 = \frac{1}{\pi}(1-x^2-y^2)^{-1/2}$ sur le domaine défini par $1-x^2-y^2 \geqslant 0$. Cependant, il est plus simple de choisir, au lieu de μ_1 et μ_2, deux nouvelles variables, ξ et θ définies par :

$$\mu_1 = \sin\theta\cos\xi \quad , \quad \mu_2 = \sin\theta\sin\xi \quad , \quad 0 \leq \theta \leq \pi/2,\ 0 \leq \xi \leq 2\pi.$$

Une intégrale du type

$$\int \frac{h(\mu_1, \mu_2)}{\sqrt{1-\mu_1^2-\mu_2}}\, d\mu_1 d\mu_2$$

s'écrit alors

$$\int_0^{\pi/2}\int_0^{2\pi} H(\xi, \theta)\sin\theta d\theta d\xi \quad , \quad \text{avec} \quad H(\xi, \theta) = h(\mu_1, \mu_2).$$

Si la fonction $h(\mu_1, \mu_2)$ est paire par rapport au couple $\mu_1\mu_2$ on a :

$$h(\mu_1, \mu_2) = h(-\mu_1, -\mu_2) \quad \text{quels que soient} \quad \mu_1 \text{ et } \mu_2.$$

Ceci entraîne $H(\theta, \xi+\pi) = H(\theta, \xi)$. On peut prolonger la définition de la fonction $H(\theta, \xi)$ au domaine $\frac{\pi}{2} \leqslant \theta \leqslant \pi$, en posant : $H(\pi-\theta, \xi) = H(\theta, \xi)$.

L'intégrale peut alors s'écrire

$$\frac{1}{2}\int_0^{\pi}\int_0^{2} \pi H(\xi, \theta)\sin\theta d\theta d\xi.$$

Le choix d'une base de fonction orthogonale est alors naturel : nous prendrons évidemment les harmoniques sphériques :

$$Y_{pq}(\theta, \xi) = L_p^q(\cos\theta)e^{iq\xi} \quad , \quad (-p \leqslant q \leqslant +p),$$

où $L_p^q(x)$ désigne la fonction de Legendre associée :

$$L_p^q(x) = (1-x^2)^{q/2}\frac{d^q}{dx^q}(L_p(x)) \quad , \quad L_p^{-q}(\xi, \theta) = L_p^q(\xi, \theta).$$

La relation d'orthogonalité de ces fonctions est :

$$(97) \qquad \int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{pq}(\theta, \xi)\overline{Y}_{p'q'}(\theta, \xi) \sin\theta d\theta d\xi = \frac{4\pi}{2\rho+1}\frac{(p+q)!}{(p-q)!}\delta_{pp'}\delta_{qq'}$$

La décomposition d'une fonction arbitraire $k(W, \Omega_e, L, \Lambda, \xi, \theta)$ s'écrira alors :

$$(98) \qquad \sum K^{pqrstu} S_p^a(W) S_q^b(\Omega_e) H_r(L) S_s^{1/2}(\Lambda) Y_{tu}(\xi, \theta).$$

si la fonction admet la symétrie définie par (96), on a $K^{pqrstu} = -K^{pqrst-u}$.

Les équations (38) à (43) s'intègrent alors sans difficulté. Le seul point délicat est l'expression de l'intégrale (42) qui porte sur un domaine d'intégration plus restreint : l'intégration par rapport à $d\mu_1$ se fait en gardant μ_2 constant, c'est-à-dire $d\theta$ et $d\xi$ liés par $\cos\sin\xi d\theta + \sin\theta\cos\xi d\xi = 0$. Alors

$$d\mu_1 = \frac{1}{\cos^2\xi}\cos\theta d\theta,$$

et (42) s'écrit :

$$\int W^2\Omega_e^2 e^{-W^2-\Omega_e^2-L^2-\Lambda^2}\frac{C}{\cos^2\xi}\cos\theta dW d\Omega_e d\Lambda d\theta = 0 \qquad \forall\xi, L.$$

— Sous réserve des modifications nécessaires dans les définitions des crochets [**R**, **S**], des ensembles d'indices I et I′ et des valeurs numériques des seconds membres, l'intégration des équations (44) à (47) se déroule formellement comme en 4.5.3. Mais l'opérateur n'est plus un opérateur symétrique : pour deux fonctions tensorielles R et S, on n'a pas l'égalité [R, S] = [S, R].

On ne peut donc plus affirmer que la suite des approximations successives de la solution de chacune des équations intégrales est monotone croissante.

BIBLIOGRAPHIE

[*1*] L. BOLTZMANN, *Vorlesungen über Gastheorie* (Leipzig, 1896-1898), traduit en anglais par S. G. BRUSCH : *Lectures on gas theory*. University of California Press, 1964.

[*2*] BRYAN, *Brit. Assoc. Reports*, 1894, 83.

[*3*] PIDDUCK, *Proc. Roy. Soc.*, A **101**, 1922, 101.

[*4*] CHAPMAN and COWLING, The mathematical theory of non Uniform gases Cambridge, 1939-1952.

[*5*] CHAPMAN and HAINSWORTH, *Phil. Mag.*, **48**, 1924, 593.

[*6*] JEANS, The dynamical theory of gases Cambridge, 1904.

[*7*] ISHIDA, *Phys. Rev.*, **10**, 1917, 305.

[*8*] TOLMAN, Principles of statistical Mechanics Oxford, 1938.

[*9*] EUCKEN, *Phys. Zeit.*, **14**, 1913, 324.

[10] WALDMANN, Dans *Proceedings of the International Seminar on the Transport properties of gases*. Brown University. Providence, 1964.
[11] WANG-CHANG et UHLENBECK, Transport properties in polyatomic gases. University of Michigan, Publication CM 681, 1951.
[12] WANG-CHANG, UHLENBECK et DE BOER, The heat conductivity and viscosity of polyatomic gases, dans *Studies in Statistical Mechanics*. Vol. II, Amsterdam, 1964.
[13] MASON et MONCHICK, *J. Chem. Phys.*, **36**, 1961, 1622.
[14] HIRSCHFELDER, CURTISS et BIRD, Molecular theory of gases and liquids, New York, 1954.
[15] WALDMANN, *Zeit. Naturforschg.*, **12***a*, 1957, 660 ; **13***a*, 1958, 609.
[16] WALDMANN, Transporterscheinungen in Gasen von mittlerem Druck dans *Handbuch der Physik*, Berlin Heidelberg, 1958.
[17] BHATNAGAR, GROSS et KROOK, *Phys. Rev.*, **94**, 1954, 511.
[18] BRAU, Models for collision processes in polyatomic gases. Harvard University. Cambridge, 1965.
[19] BRAU, *Phys. Fluids*, **10**, 1967, 48.
[20] CURTISS, *J. Chem. Phys.*, **24**, 1956, 225.
[21] CURTISS et MUCKENFUSS, *J. chem. Phys.*, **26**, 1957, 1619.
[22] CURTISS et MUCKENFUSS, *J. chem. Phys.*, **27**, 1958, 1257.
[23] LIVINGSTONE et CURTISS, *J. chem. Phys.*, **31**, 1959, 1643.
[24] TAXMAN, *Phys. Rev.*, **110**, 1958, 1235.
[25] CURTISS et DAHLER, *J. chem. Phys.*, **38**, 1963, 2352.
[26] DAHLER et SATHER, *J. chem. Phys.*, **38**, 1963, 2365.
[27] SANDLER et DAHLER, *J. chem. Phys.*, **43**, 1965, 1750.
[28] KAGAN et AFANAS'EV, *Soviet Phys. J. E. T. P.*, **14**, 1962, 1096 ; *Zh. Eksperim. i teor. Fiz.*, **41**, 1961, 1536.
[29] WALDMANN, *S. Naturforsch*, **18***a*, 1963, 1033.
[30] CONDIFF, LU et DAHLER, *J. chem. Phys.*, **42**, 1965, 3445.
[31] SANDLER et DAHLER, *J. chem. Phys.*, **44**, 1966, 1229.
[32] MCLAUGHLIN et DAHLER, *J. chem. Phys.*, **44**, 1966, 4453.
[33] SHE et SATHER, *J. chem. Phys.*, **47**, 1967, 4978.
[34] GRAD, Principles of the kinetic theory of gases, dans *Handbuch der Physik*, Berlin Heidelberg, 1958.
[35] BERROIR, *C. R. Acad. Sc. Paris*, **264**, série A, 1967, 648.
[36] BERROIR, *C. R. Acad. Sc. Paris*, **267**, série A, 1968, 301.
[37] BERROIR, *C. R. Acad. Sc. Paris*, **267**, série A, 1968, 453.
[38] SATHER et DAHLER, *J. chem. Phys.*, **35**, 1961, 2029.
[39] KENNARD, Kinetic theory of gases, New York, 1938.
[40] O'TOOLE et DAHLER, *J. chem. Phys.*, **33**, 1960, 1487.
[41] ERDELYI, MAGNUS, OBERHETTINGER et TRICOMI, *Higher transcendental functions*, vol. 2, New York, 1963.
[42] HOBSON, Theory of spherical and ellipsoïdal harmonics, Cambridge, 1931.
[43] LANDAU et LIFCHITZ, Mécanique quantique, Moscou, 1967.
[44] COURANT et HILBERT, *Methods of mathematical physics*, vol. I, New York, 1953.

Manuscrit reçu le 2 juin 1969.