Chapitre II

Equations cinétiques

II.1 Introduction

Pour décrire l'état d'un gaz on peut adopter les méthodes de l'hydrodynamique, c'est-à-dire introduire un certain nombre de grandeurs macroscopiques telles que la densité, la vitesse du fluide, la pression, etc. On peut aussi, introduire des grandeurs telles que les fonctions de distribution des vitesses qui donnent une description microscopique classique du fluide. Dans ce chapitre, après avoir donné l'équation de Liouville ; nous établirons les équations "cinétiques", qui sont les équations d'évolution des fonctions de distributions simple et double. La méthode utilisé est dite «régressive», elle est basée sur une série d'intégrations qui correspondent chacune à la disparition d'une variable et à la perte de 1'information correspondante sur l'état du système.

A chaque étape de cette méthode régressive nous rencontrerons cependant une difficulté de principe : l'équation de Liouville est la seule qui donne une description "complète" de 1'evolution du fluide. Le système des équations cinétiques est indéterminé si on l'arrête à un nombre fini d'équations. C'est seulement en considérant un système à un nombre très élevé d'équations cinétiques (nombre égal à celui des particules) qu'on peut reconstituer une description équivalente à celle fournie par 1'equation de Liouville.

II.2 Equation de Liouville

On sait que théorème de Liouville peut avoir une formulation sous la forme :

$$\frac{d\rho}{dt}=\frac{\partial\rho}{\partial t}+\sum_{i=1}^{3N}\left(\frac{\partial\rho}{\partial q_i}\frac{\partial q_i}{\partial t}+\frac{\partial\rho}{\partial p_i}\frac{\partial p_i}{\partial t}\right)=0 \qquad \text{(II-1)}$$

Relation connue sous le nom « équation de Liouville »

En regroupant trois par trois les termes relatifs à une même particule i, on peut l'écrire sous la forme vectorielle :

$$\frac{dD}{dt}=\frac{\partial D}{\partial t}+\sum_{i=1}^{N}\vec{\mathrm{v}}_i.\frac{\partial D}{\partial \vec{r}_i}+\sum_{i=1}^{N}\frac{\vec{F}_i+\sum_{J\neq I}\vec{F}_{ij}}{m}.\frac{\partial D}{\partial \vec{\mathrm{v}}_i}=0 \qquad \text{(II-2)}$$

Avec $$D(\vec{r}_i,\vec{\mathrm{v}}_i,t)=m^{3N}\rho(\mathrm{q_i},\mathrm{p_i},\mathrm{t}) \qquad \text{(II-3)}$$

$\vec{F_\iota}+\sum_{J\neq I}\overrightarrow{F_{\iota J}}$ étant la force totale agissant sur la particule i.

On dit qu'il n'y a pas de corrélations entre les particules quand la fonction D est un produit de N fonctions relatives chacune à 1'une des particules, C'est-à-dire quand on a :

$$D(\vec{r}_i,\vec{\mathrm{v}}_i,t)=\prod_{i=1}^{N}D_0(\vec{r}_i,\vec{\mathrm{v}}_i,t) \qquad \text{(II-4)}$$

Cette identité est imposée par 1'indiscernabilite des particules.

II.3 Fonction de distribution et densité simples

La fonction D contient le maximum d'information que l'on puisse avoir sur le fluide ; en fait, on ne peut jamais atteindre ce maximum et l'on doit se contenter de fonctions décrivant moins 'état du fluide. Cherchons donc, par une méthode dite régressive, la probabilité des états du système dans lesquels la particule 1 est à l'intérieur de l'élément de volume d^3r_1 et possède un vecteur vitesse dont 1'extremite est à l'intérieur de 1'element de volume d^3v_1, les états des particules 2,3, ..., N étant par contre absolument quelconques. On obtient évidemment cette probabilité en intégrant la probabilité élémentaire sur tous les espaces des positions d^3r_2,... , d^3r_N et sur tous les espaces des vitesses d^3v_2,..., d^3v_N, ce qui s'écrit :

$$dp_1=d^3r_1\ d^3\mathrm{v}_1\int_{r_i}..\int_{\mathrm{v}_i}D(\vec{\mathrm{r}}_i,\vec{\mathrm{v}}_i,t)\prod_{i=2}^{N}d^3r_i\ d^3\mathrm{v}_i \qquad \text{(II-5)}$$

Il faut d'ailleurs noter que la numérotation des particules introduite pour définir D est artificielle et arbitraire, puisque les particules sont indiscernables. le nombre probable dN de particules se trouvant à l'intérieur de l'élément de volume d^3r_1 avec un vecteur vitesse dont l'extrémité est à l'intérieur de 1'element de volume d^3v_1. Ce nombre est égal à la probabilité, valable pour 1'une quelconque des particules, multipliée par N :

$$dN_1=d^3r_1\ d^3\mathrm{v}_1\ \mathrm{N}\int_{r_i}..\int_{\mathrm{v}_i}D(\vec{\mathrm{r}}_i,\vec{\mathrm{v}}_i,t)\prod_{i=2}^{N}d^3r_i\ d^3\mathrm{v}_i \qquad \text{(II-6)}$$

Qui peut se mettre suivante :

$$dN_1=f_1(\vec{r}_1,\vec{\mathrm{v}}_1,\mathrm{t})\ d^3r_1\ d^3\mathrm{v}_1 \qquad \text{(II-7)}$$

En posant :

$$f_1=N\int_{r_i}..\int_{v_i}D(\vec{\mathrm{r}}_i,\vec{\mathrm{v}}_i,t)\prod_{i=2}^{N}d^3r_i\ d^3\mathrm{v}_i \qquad \text{(II-8)}$$

La fonction f_1 appelée fonction de distribution simple des vitesses. C'est la grandeur la plus généralement utilisée en théorie cinétique des fluides.

En général, f_1 est une fonction de $\vec{r}_1, \vec{v}_1$ et t. Si elle ne dépend pas effectivement de $\vec{r}_1$, on dira que le gaz est homogène. D'autre part, la fonction de distribution simple peut être isotrope dans 1'espace des vitesses, ou anisotrope. On dira qu'elle est anisotrope si elle dépend de l'orientation du vecteur $\vec{v}_1$.

A partir de f_1 on peut déterminer la densité simple (locale) obtenue par intégrations de fonction de distribution simple sur tout 1'espace des vitesses :

$$n_1(\vec{r}_1, t) = \int f_1(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t)\ d^3v_1 \qquad \text{(II-9)}$$

II.4 Fonction de distribution et densité doubles

Considérons maintenant deux éléments de volume d^3r_1 et d^3r_2 dans 1'espace ordinaire, et deux éléments de volume d^3v_1 et d^3v_2 dans 1'espace des vitesses, et cherchons le nombre probable de couples de particules tels que la première particule du couple soit située dans le volume d^3r_1 avec l'extrémité de son vecteur vitesse dans d^3v_1, cependant que la deuxième est dans d^3r_1 avec 1'extremite de son vecteur vitesse dans d^3v_2. Ce nombre probable dN_{12} est égal à la probabilité que le système soit dans un état tel que deux particules déterminées, par exemple les particules 1 et 2 satisfassent aux conditions imposées, multipliée par le nombre de couples possibles, soit N(N — 1) ; on peut donc écrire : système d 'équations de BBGKY en posant :

$$dN_{12} = f_{12}\ d^3r_1\ d^3v_1 d^3r_2\ d^3v_2 \qquad \text{(II-10)}$$

En posant :

$$f_{12} = N(N-1) \int_{r_i} .. \int_{v_i} D(\vec{r}_i, \vec{v}_i, t) \prod_{i=3}^{N} d^3r_i\ d^3v_i \qquad \text{(II-11)}$$

La fonction f_{12} appelée fonction de distribution double. Par intégration sur les vitesses on introduit la densité double :

$$n_{12} = \int f_{12}\ d^3v_1 d^3v_2 \qquad \text{(II-12)}$$

S'il n'y a pas de corrélations, on a d'après (II-4) , (II-8) et (8.11) :

$$f_{12} = \frac{N-1}{N} f_1 f_2 \qquad \text{(II-13)}$$

N étant supposé très élevé on a donc approximativement :

$$f_{12} = f_1 f_2 \qquad et \qquad n_{12} = n_1 n_2$$

II.4 Fonctions de distribution et densités multiples

Les définitions données ci-dessous se généralisent facilement. A partir de D on peut définir la fonction de distribution et la densité triples :

$$f_{123} = N(N-1)(N-2) \int_{r_i}..\int_{v_i} D(\vec{r}_i, \vec{v}_i, t) \prod_{i=4}^{N} d^3r_i \; d^3v_i \qquad \text{(II-14)}$$

et

$$n_{123} = \int f_{123} \;\; d^3v_1 d^3v_2 d^3v_3 \qquad \text{(II-15)}$$

On peut écrire les fonctions quadruples, etc. La dernière est :

$$f_{123...N} = N!\,D(\vec{r}_i, \vec{v}_i, t) \qquad \text{(II-16)}$$

II.5 Système d'équations de BBGKY

II.5.1 Equation d'évolution de la fonction f_1

En multipliant 1'equation de Liouville (II-2) par N et en 1'integrant sur les variables $\vec{r}_2, \vec{v}_2, \vec{r}_3, \vec{v}_3, ..., \vec{r}_N, \vec{v}_N$, on obtient 1'equation d'évolution de f_1. Ce calcul conduit au résultat suivant :

$$\frac{dD}{dt} = \frac{\partial D}{\partial t} + \sum_{i=1}^{N} \vec{v}_i . \frac{\partial D}{\partial \vec{r}_i} + \sum_{i=1}^{N} \frac{\vec{F_i} + \sum_{J \neq I} \vec{F_{ij}}}{m} . \frac{\partial D}{\partial \vec{v}_i} = 0$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v}_1 . \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \frac{\vec{F_1}}{m} . \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} + \int \frac{\vec{F_{12}}}{m} . \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1} d^3r_2 d^3v_2 = 0 \qquad \text{(II-17)}$$

On peut pour discuter la signification des divers termes de cette équation la récrire sous la forme :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v}_1 . \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \frac{\vec{F_1}}{m} . \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} = -B(f_{12}) \qquad \text{(II-18)}$$

avec

$$B(f_{12}) = -\int \frac{\vec{F_{12}}}{m} . \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1} d^3r_2 d^3v_2 \qquad \text{(II-19)}$$

Sous cette forme elle exprime que la variation, en un point donne du gaz, de la fonction de distribution est donnée en fonction du temps par la somme de trois termes :

• **Le premier terme**, $\vec{v}_1 . \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1}$ exprime 1'infmence des phénomènes de diffusion ; $\vec{v}_1$ est la vitesse des molécules et $\frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1}$ est le gradient de la fonction de distribution $f_1$dans 1'espace des positions.

• **Le deuxième terme**, $\frac{\vec{F_1}}{m}.\frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1}$, exprime l'action des forces appliquées. $\frac{\vec{F_1}}{m}$ est l'accélération qui est imposée aux molécules par des forces d'origine extérieure au gaz, $\frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1}$ est le gradient de la fonction f_1 dans 1'espace des vitesses ; sous l'action des forces imposées, les vitesses des molécules varient ; ces forces tendent donc à modifier la fonction de distribution des vitesses.

• **Enfin, le troisième terme B représente**, de façon non explicite ici, l'influence des interactions entre particules.

II.4.2 Equation d'évolution de la fonction f_{12}

En effectuant le même calcul, mais avec une intégration de moins, on peut Obtenir l'équation d'évolution de la fonction f_{12} :

$$\frac{\partial f_{12}}{\partial t}+\vec{v}_1.\frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{r}_1}+\vec{v}_2.\frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{r}_2}+\frac{\vec{F_1}+\vec{F_{12}}}{m}.\frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1}+\frac{\vec{F_2}+\vec{F_{21}}}{m}.\frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_2}$$
$$+\int\frac{\vec{F_{13}}}{m}.\frac{\partial f_{123}}{\partial \vec{v}_1}d^3r_3d^3v_3+\int\frac{\vec{F_{23}}}{m}.\frac{\partial f_{123}}{\partial \vec{v}_2}d^3r_3d^3v_3=0 \qquad \text{(II-20)}$$

Où les deux derniers termes représentent l'effet des interactions triples.

II.6 Système d'équations de BBGKY- Méthodes de fermeture

Les équations (II-18) et (II-20) ferment un système indéterminé ; la première ne permet de déterminer f_1 que si on connait f_{12} et la deuxième de déterminer f_{12} que si on connait f_{123} . On pourrait écrire une équation d'évolution pour f_{123}, mais elle ferait apparaitre f_{1234}, etc.

A partir de l'équation de Liouville, on obtient donc, par la méthode ci-dessus, dite méthode "régressive", un système de N équations plus simples, mais couplées de proche en proche ; ce système est appelé système de Born-Bogolioubov-Green-Kirkwood-Yvon, ou plus simplement système BBGKY. Pour pouvoir 1'utiliser pratiquement, il faut l'arrêter à un stade quelconque, en faisant une hypothèse simplificatrice sur 1'une des fonctions de distribution, d'ordre plus ou moins élevé. On arrive ainsi à obtenir un système détermine.

Les méthodes de fermeture les plus simples du système BBGKY. proposées par divers auteurs conduisent à donner des expressions approchées de $B(f_{12})$ dans lesquelles ne figure plus que la fonction de distribution f_1 ; les diverses équations d'évolution ainsi obtenues correspondent à des approximations différentes et s'appellent :

• équation de Boltzmann sans second membre
• équation de Liouville a une particule
• équation de Vlasov
• équation de Boltzmann
• équation de Fokker-Planck
• équation de Landau, Rosenbluth, Mac Donald et Judd

Les plus importantes de ces équations sont 1'equation de Boltzmann et 1'equation de Vlasov : 1'equation de Boltzmann s'applique aux gaz neutres ou faiblement ionises (collisions binaires dominantes) et l'equation de Vlasov aux plasmas (interactions collectives dominantes).

II.6.1 Equation de Liouville a une particule

L'approximation la plus simple que l'on peut faire dans l'équation (II-18) consiste à négliger purement et simplement les interactions entre particules. En supposant donc $B(f_{12})=0$ on peut 1'ecrire sous la forme :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v}_1 . \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \frac{\vec{F}_1}{m} . \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} = 0 \qquad \text{(II-21)}$$

L'équation ainsi écrite est 1'equation de Boltzmann sans second membre ; elle est d'ailleurs formellement identique à une équation de Liouville à une seule particule. Elle est utile pour décrire 1'evolution d'un gaz de particules chargées dans un champ électromagnétique d'origine extérieure ; elle suppose évidemment que les particules sont en densité assez faible pour ne pas modifier ce champ extérieur ; elle ne fournit pas plus d'informations que 1'etude générale des trajectoires des particules, mais elle permet de traiter statistiquement un grand nombre de trajectoires correspondant à des conditions initiales différentes.

L'équation de Boltzmann sans second membre est utilisée notamment dans les domaines suivants :

- trajectoires des particules dans la magnétosphère ;
- accélérateurs de particules, sources d'ions ;
- machines à plasma pour la fusion contrôlée (régimes à basse densité, problèmes d'injection).

II.6.2 Equation de Vlasov

Quand la densité des particules est telle que l'on ne peut plus négliger les interactions, l'hypothèse la plus simple que l'on puisse faire consiste à négliger les corrélations entre particules. Dans B(f_{12}) on peut alors poser :

$$f_{12} = f_1 f_2 \qquad \text{(II-22)}$$

Cette approximation n'est valable que si les particules 1et 2 sont assez éloignées l'une de 1'autre. Ce qui revient à ne tenir compte, dans la dynamique du plasma, que des interactions lointaines collectives. En supposant de plus que le plasma est non relativiste on peut ne retenir que les interactions électrostatiques celles-ci ne dépendant donc pas des vitesses :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{\mathrm{v}}_1 . \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \frac{q}{m}\left(\vec{E}_1 + \vec{\mathrm{v}}_1 \wedge \vec{\mathrm{B}}\right) . \frac{\partial f_1}{\partial \vec{\mathrm{v}}_1} = -B(f_{12}) \qquad \text{(II-23)}$$

On obtient en combinant (II-19) et (II-22) :

$$B(f_{12}) = -\frac{\partial f_1}{\partial \vec{\mathrm{v}}_1} \int n_2 \frac{\overrightarrow{F_{12}}}{m}\, d^3 r_2 = -\frac{q}{m}\overrightarrow{E_1'} . \frac{\partial f_1}{\partial \vec{\mathrm{v}}_1} \qquad \text{(II-24)}$$

$\overrightarrow{E_1'}$ étant le champ de charge d'espace défini par la formule :

$$\overrightarrow{E_1'} = \int n_2 \overrightarrow{F_{12}}\, d^3 r_2 \qquad \text{(II-25)}$$

En reportant (II-24) dans (II-23), on obtient finalement :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{\mathrm{v}}_1 . \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \frac{q}{m}\left(\vec{E}_1 + \overrightarrow{E_1'} + \vec{\mathrm{v}}_1 \wedge \vec{\mathrm{B}}\right) . \frac{\partial f_1}{\partial \vec{\mathrm{v}}_1} = 0 \qquad \text{(II-26)}$$

L'équation ainsi décrite est 1'equation de Vlasov. Elle est formellement identique à 1'equation de Boltzmann sans second membre, à condition d'inclure, dans les forces appliquées aux particules, les champs macroscopiques produits par le plasma ; elle permet donc d'étudier, de façon self-consistante, les mouvements collectifs d'un gaz de particules chargées relativement dense. elle tient compte, dans les interactions collectives, qui résultent de l'action sur chaque particule chargée du champ "moyen" produit par les autres charges.

II.7 Etablissement des équations de transport

II.7.1 Définitions des grandeurs hydrodynamiques

L'état microscopique d'un gaz pur est assez bien défini si l'on connaît la fonction de distribution simple des vitesses $f\left(\vec{r}, \vec{\mathrm{v}}, t\right)$. Dans de nombreux cas, il est difficile ou inutile de chercher à connaître cette fonction. On utilisera alors une description plus simple en introduisant les grandeurs macroscopiques suivantes :

- La densité :

$$n(\vec{r},t)=\int f\left(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t\right)d^3\mathrm{v} \qquad (\text{II-27})$$

- La vitesse moyenne du fluide :

$$\vec{u}(\vec{r},t)=\frac{1}{n(\vec{r},t)}\int \vec{\mathrm{v}}.f\left(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t\right)d^3\mathrm{v} \qquad (\text{II-28})$$

- L'énergie cinétique moyenne des particules :

$$\overline{U}=\frac{1}{n}\int\frac{1}{2}mv^2 fdv$$

II.7.2 Equations de transport

Soit $f(\vec{r},\vec{v},t)$ la fonction de distribution qui obéit à l'équation de Boltzmann :

$$\frac{\partial f}{\partial t}+\vec{\mathrm{v}}.\vec{\nabla}_r f+\frac{\vec{F}}{m}.\vec{\nabla}_{\mathrm{v}} f=\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{coll}}$$

Soit, de façon générale, $A(\vec{r},\vec{v},t)$ une fonction du vecteur vitesse, du vecteur position et du temps, dont la valeur moyenne de la grandeur $A(\vec{r},\vec{v},t)$ est définie par l'équation :

$$A(\vec{r},t)=\frac{1}{n(\vec{r},t)}\int \mathrm{A}\left(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t\right)f\left(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t\right)d^3\mathrm{v} \qquad (\text{II-30})$$

multiplions l'équation de Boltzmann par la grandeur $A(\vec{r},\vec{v},t)$, puis intégrons sur toutes les vitesses :

$$\int_{\mathrm{v}} A\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)d^3\mathrm{v}+\int_{\mathrm{v}} A\vec{\mathrm{v}}.\vec{\nabla}_r f d^3\mathrm{v}+\int_{\mathrm{v}} A\frac{\vec{F}}{m}.\vec{\nabla}_{\mathrm{v}} fd^3\mathrm{v}=\int_{\mathrm{v}} A\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{coll}} d^3\mathrm{v} \qquad (\text{II-31})$$

<u>Terme de variation temporelle</u>

Le premier terme de l'équation (II-31) peut s'écrire sous la forme :

$$\int_{(v)} A\frac{\partial f}{\partial t}d^3\mathrm{v}=\frac{\partial}{\partial t}\left[\int_{(v)} Afd^3\mathrm{v}\right]-\int_{(v)}\frac{\partial A}{\partial t}fd^3\mathrm{v} \qquad (\text{II-32})$$

$$\int_{(v)} A\frac{\partial f}{\partial t}d^3\mathrm{v}=\frac{\partial}{\partial t}\left(n\langle A\rangle\right)-n\frac{\partial\langle A\rangle}{\partial t} \qquad (\text{II-33})$$

Terme faisant intervenir le gradient spatial de f

Nous pouvons le transformer pour l'écrire sous la forme :

$$\int_{(v)} A\mathrm{v}_i \frac{\delta f}{\delta x_i} d^3\mathrm{v} = \frac{\delta}{\delta x_i}\left[\int_{(v)} f\mathrm{v}_i A d^3 v\right] - \int_{(v)} \frac{\delta A}{\delta x_i}\mathrm{v}_i f d^3\mathrm{v} \qquad \text{(II-35)}$$

$$\int_{(v)} A\mathrm{v}_i \frac{\delta f}{\delta x_i} d^3\mathrm{v} = \frac{\delta}{\delta x_i}\left(n\left\langle \mathrm{v}_i A\right\rangle\right) - n\left\langle \mathrm{v}_i \frac{\delta A}{\delta x_i}\right\rangle \qquad \text{(II-36)}$$

$$\int_{(v)} A\vec{\mathrm{v}}.\overrightarrow{\nabla_r} f d^3 v = \overrightarrow{\nabla_r}\left(n\left\langle \vec{\mathrm{v}}A\right\rangle\right) - n\left\langle \vec{\mathrm{v}}.\overrightarrow{\nabla_r} A\right\rangle \qquad \text{(II-37)}$$

Terme faisant intervenir le gradient de f dans l'espace des vitesses

On simplifie le troisième terme en faisant une intégration par partie :

$$\int_{(v)} A\frac{F_i}{m}\frac{\partial f}{\partial \mathrm{v}_i} d^3\mathrm{v} = \int_{(v)} \frac{\partial}{\partial \mathrm{v}_i}\left(A\frac{F_i}{m} f\right) d^3\mathrm{v} - \int_{(v)} \frac{1}{m}\frac{\partial (AF_i)}{\partial \mathrm{v}_i} f d^3\mathrm{v} \qquad \text{(II-38)}$$

Or

$$\int_{(v)} \frac{\partial}{\partial \mathrm{v}_i}\left(A\frac{F_i}{m} f\right) d^3\mathrm{v} = \iint\left[\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{AF_i}{m}\frac{\partial f}{\partial \mathrm{v}_i} d\mathrm{v}_i\right] d\mathrm{v}_j d\mathrm{v}_k = 0 \qquad \text{(II-39)}$$

car $\left[\frac{AF_i}{m} f\right]_{-\infty}^{+\infty} = 0$ la fonction f infinie n'est pas acceptable physiquement.

Donc il reste :

$$\int_{(v)} \frac{1}{m}\frac{\partial (AF_i)}{\partial \mathrm{v}_i} f d^3\mathrm{v} = -\frac{n}{m}\left\langle \vec{\nabla}_\mathrm{v} AF_i\right\rangle = -\frac{nF_i}{m}\left\langle \vec{\nabla}_\mathrm{v} A\right\rangle \qquad \text{(II-40)}$$

Car la force est indépendante de la vitesse des particules

Et on trouve finalement :

$$\int_{\mathrm{v}} A\frac{\overrightarrow{F}}{m}.\vec{\nabla}_\mathrm{v} f d^3\mathrm{v} = -\frac{n}{m}\vec{F}.\left\langle \vec{\nabla}_\mathrm{v} A\right\rangle \qquad \text{(II-41)}$$

Remplaçons dans l'équation (II-31) chaque terme par sa valeur

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(n\langle A\rangle\right) - n\frac{\partial\langle A\rangle}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla_r}\left(n\left\langle \vec{\mathrm{v}}A\right\rangle\right) - n\left\langle \vec{\mathrm{v}}.\overrightarrow{\nabla_r} A\right\rangle - \frac{n}{m}\vec{F}.\left\langle \vec{\nabla}_\mathrm{v} A\right\rangle = \int_{\mathrm{v}} A\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{\mathrm{coll}} d^3\mathrm{v} \qquad \text{(II-42)}$$

Nous allons maintenant utiliser cette relation pour obtenir les différents moments hydrodynamiques.

II.8 Les trois équations fondamentales de conservation

II.8.1 Equation de continuité

Elle correspond au premier moment de l'équation de transport (moment d'ordre 0), elle est obtenue en posant $A = 1$

De sorte que :

$$\frac{\partial \langle A \rangle}{\partial t} = 0 \qquad \text{et} \qquad \overrightarrow{\nabla_r} A = \vec{\nabla}_{\mathrm{v}} A = 0$$

L'équation (II-42) se réduit à :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla_r}\left(n \langle \vec{\mathrm{v}} \rangle\right) = \int_{\vec{\mathrm{v}}} s(f)\,\mathrm{d}^3\mathrm{v} \qquad (\text{II-43})$$

Cette équation est appelée équation de conservation du nombre de particules ou équation de continuité. Elle est de nature scalaire (tenseur d'ordre zéro).

Le facteur $S(f)d^3v$ représente le nombre net de particules qui ont rejoint (quitté si le facteur est négatif) l'élément de volume d^3v de l'espace des vitesses par suite de collisions. Dans le cas de collisions élastiques, il n'y a ni création ni disparition de particules dans le volume du plasma. En effet, ces collisions ne font que modifier la distribution des vitesses des particules, ce qui ne change pas, localement, leur nombre total, et l'intégrale est donc forcément nulle. Alors :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla_r}\left(n \langle \vec{\mathrm{v}} \rangle\right) = 0 \qquad (\text{II-44})$$

On peut alors remplacer $\langle \vec{v} \rangle$ par $\vec{u}$ = vitesse moyenne de l'ensemble des particules :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \overrightarrow{\nabla_r}\left(n \vec{\mathrm{u}}\right) = 0 \qquad (\text{II-44})$$

C'est l'équation de conservation de l'ensemble des particules, le terme de collision étant nul (globalement, les termes de collision se compensent).

En multipliant (II-44) par la masse de l'espèce, ou par la charge de l'espèce, on obtient respectivement la loi de conservation de la masse ou celle de la charge électrique,

II.8.2 Equation de transport de la quantité de mouvement

Ce moment correspond à la variable microscopique : $A = m\vec{\mathrm{v}}$

Ce vecteur ainsi défini entraînant :

$\frac{\partial m\vec{\mathrm{v}}}{\partial t} = 0$, $\vec{\nabla}_r m\vec{\mathrm{v}}=0$, $\vec{\nabla}_v m\vec{\mathrm{v}}= m\underline{I}$

L'équation (II-42) se réduit à :

$$m\frac{\partial}{\partial t}\left(n\vec{u}\right) + m\overrightarrow{\nabla_r}\left(n\left\langle \vec{\mathrm{v}}.\vec{\mathrm{v}}\right\rangle\right) - n\vec{F}.\vec{I} \;= \int_{\mathrm{v}} m\vec{\mathrm{v}}s(f)d^3\mathrm{v} \qquad \left(\text{II-45}\right)$$

Posons : $\vec{\mathrm{v}} = \vec{u} + \vec{c}$ (II-47)

où $\vec{c}$ est la vitesse d'une particule relativement à la vitesse moyenne $\left\langle \vec{\mathrm{v}} \right\rangle = \vec{u}$ de l'ensemble des particules. vitesse de moyenne La vitesse $\vec{c}$ est donc une vitesse de moyenne nulle $\left\langle \vec{c} \right\rangle = \vec{0}$

Nous obtenons alors, compte tenu de (II-47):

$$\left\langle \vec{\mathrm{v}}\vec{\mathrm{v}} \right\rangle = \left\langle \left(\vec{u}+\vec{c}\right)\left(\vec{u}+\vec{c}\right) \right\rangle$$
$$\left\langle \vec{\mathrm{v}}\vec{\mathrm{v}} \right\rangle = \left\langle \vec{u}\vec{u} \right\rangle + \left\langle \vec{c}\vec{c} \right\rangle + 2\vec{u}.\left\langle \vec{c} \right\rangle$$
$$\left\langle \vec{\mathrm{v}}\vec{\mathrm{v}} \right\rangle = \vec{u}\vec{u} + \left\langle \vec{c}\vec{c} \right\rangle$$

D'autre part on a :

$$\vec{\nabla}\left(mn\left\langle \vec{\mathrm{v}}\vec{\mathrm{v}} \right\rangle\right) = \vec{\nabla}\left(mn\left\langle \vec{c}\vec{c} \right\rangle\right) + \vec{\nabla}\left(mn\left\langle \vec{u}\vec{u} \right\rangle\right)$$
$$\vec{\nabla}\left(mn\left\langle \vec{\mathrm{v}}\vec{\mathrm{v}} \right\rangle\right) = \vec{\nabla}\left(mn\left\langle \vec{c}\vec{c} \right\rangle\right) + m\vec{u}\vec{\nabla}\left(n\vec{u}\right) + nm\left(\vec{u}\vec{\nabla}\right)\vec{u}$$

$$m\frac{\partial}{\partial t}\left(n\vec{u}\right) + m\overrightarrow{\nabla_r}\left(n\left\langle \vec{\mathrm{v}}.\vec{\mathrm{v}}\right\rangle\right) + \vec{\nabla}_r\left(mn\left\langle \vec{c}\vec{c} \right\rangle\right) - n\vec{F}.\vec{I} \;= \int_{\mathrm{v}} m\vec{\mathrm{v}}s(f)d^3\mathrm{v} \qquad \left(\text{II-48}\right)$$

On définit un tenseur de pression cinétique $\overline{\overline{P}} = mn\left\langle \vec{c}\vec{c} \right\rangle$ et en tenant compte de la relation de continuité (II-44) (cas particulier d'un terme collisionnel nul) :

$$\frac{m\partial\left(n\vec{u}\right)}{\partial t} = m\left[n\frac{\partial\vec{u}}{\partial t} - \vec{u}\nabla\left(n\vec{u}\right)\right] \qquad \left(\text{II-46}\right)$$

Puisque :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(n\left\langle m\vec{\mathrm{v}} \right\rangle\right) = m\left[n\frac{\partial\vec{u}}{\partial t} + \vec{u}\frac{\partial n}{\partial t}\right]$$

la relation (II-48) prend la forme usuelle suivante :

$$mn\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u}\vec{\nabla}\right)\vec{u} + \vec{\nabla}\overline{\overline{P}} - n\vec{F} = \int_{\mathrm{v}} m\vec{\mathrm{v}}s(f)d^3\mathrm{v} \qquad \left(II-49\right)$$

avec

$$\vec{c} = c_x\vec{i} + c_y\vec{j} + c_z\vec{k}$$

$$\overline{\overline{P}} = nm\begin{bmatrix} \langle c_x^2\rangle & \langle c_x c_y\rangle & \langle c_x c_z\rangle \\ \langle c_y c_x\rangle & \langle c_y^2\rangle & \langle c_y c_z\rangle \\ \langle c_z c_x\rangle & \langle c_z c_y\rangle & \langle c_z^2\rangle \end{bmatrix}$$

Si la pression est isotrope $\langle c_x c_y\rangle$,$\langle c_x c_z\rangle,\langle c_y c_x\rangle,\langle c_y c_z\rangle,\langle c_z c_x\rangle,\langle c_z c_y\rangle$ disparaissent.

$$\langle c_x^2\rangle = \langle c_y^2\rangle = \langle c_z^2\rangle = \frac{c^2}{2}$$

$$\overline{\overline{P}} = \frac{nm}{3}\begin{bmatrix} c^2 & 0 & 0 \\ 0 & c^2 & 0 \\ 0 & 0 & c^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} P & 0 & 0 \\ 0 & P & 0 \\ 0 & 0 & P \end{bmatrix} = PI$$

$$mn\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{u}\vec{\nabla}\right)\vec{u} + \vec{\nabla}P - n\vec{F} = \int_{\mathrm{v}} m\vec{\mathrm{v}}s(f)d^3\mathrm{v} \qquad (II-49)$$

Remarque :

Il est intéressant de comparer l'équation (II-49) avec l'équation hydro- dynamique du transfert de quantité de mouvement de NAVIER-STOKES dans l 'hypothèse d'un fluide incompressible.

$$\rho M\left(\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\mathrm{v}}\vec{\nabla}\right)\mathrm{v} = -\vec{\nabla}P + n\vec{F} + \eta\Box v \qquad (II-50)$$

II.8.2 Equation de transport de l'énergie cinétique

Elle correspond au troisième moment de l'équation de transport (moment d'ordre 2), elle est obtenue en posant :

$$A = \frac{1}{2}mv^2$$

L'équation (II-42) prend la forme suivante :

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[n\left\langle\frac{1}{2}mv^2\right\rangle\right] + \vec{\nabla}_r\left[n\left\langle\frac{1}{2}mv^2\vec{v}\right\rangle\right] - n\vec{F}\left\langle\vec{\mathrm{v}}\right\rangle = \int_{\mathrm{v}}\frac{1}{2}mv^2 s(f)d^3\mathrm{v} \qquad (II-51)$$

Avec

$$\langle v^2\rangle = u^2 + \langle c^2\rangle$$

La pression est isotrope $\frac{1}{3}nm\langle c^2\rangle = P$

$$n\left\langle\frac{1}{2}mv^2\right\rangle = \frac{1}{2}nmu^2 + \frac{3}{2}P$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[n\left\langle\frac{1}{2}mv^2\vec{v}\right\rangle\right]=\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{1}{2}nmu^2+\frac{3}{2}P\right] \qquad (II-52)$$

Calcul de $\vec{\nabla}_r\left[n\left\langle\frac{1}{2}mv^2\vec{v}\right\rangle\right]$

$$\left\langle v^2\vec{v}\right\rangle=\left\langle\left(c^2+u^2+2\vec{u}\vec{c}\right)\left(\vec{c}+\vec{u}\right)\right\rangle$$

$$\left\langle v^2\vec{v}\right\rangle=\left\langle c^2\vec{c}+u^2\vec{c}+2\vec{c}\left(\vec{u}\vec{c}\right)+c^2\vec{u}+u^2\vec{u}+2\vec{u}\left(\vec{u}\vec{c}\right)\right\rangle$$

$$\left\langle v^2\vec{v}\right\rangle=\left\langle c^2\vec{c}\right\rangle+u^2\underbrace{\left\langle\vec{c}\right\rangle}_{=0}+2\vec{u}\left\langle\vec{c}\vec{c}\right\rangle+\left\langle c^2\right\rangle\vec{u}+\left\langle u^2\vec{u}\right\rangle+2\underbrace{\left\langle\vec{c}\right\rangle}_{=0}\left\langle\vec{u}\vec{u}\right\rangle$$

$$\left\langle v^2\vec{v}\right\rangle=\left\langle c^2\vec{c}\right\rangle+\underbrace{2\vec{u}\left\langle c^2\right\rangle+\left\langle c^2\right\rangle\vec{u}}_{5/2\frac{P}{nm}\vec{u}}+\left\langle u^2\vec{u}\right\rangle$$

la pression est isotrope $\frac{1}{3}nm\left\langle c^2\right\rangle=P$

donc

$$\vec{\nabla}_r\left[n\left\langle\frac{1}{2}mv^2\right\rangle\right]=\vec{\nabla}_r\left[\frac{nm}{2}\left\langle c^2\vec{c}\right\rangle+\frac{nm}{2}u^2\vec{u}+\frac{5}{2}P\vec{u}\right] \qquad (II-53)$$

par définition : $\vec{Q}=\frac{nm}{2}\left\langle c^2\vec{c}\right\rangle \qquad (II-54)$

donc

$$\vec{\nabla}_r\left[n\left\langle\frac{1}{2}mv^2\right\rangle\right]=\vec{\nabla}_r\left[\vec{Q}+\frac{nm}{2}u^2\vec{u}+\frac{5}{2}P\vec{u}\right]$$

$$=\vec{\nabla}_r\vec{Q}+\vec{\nabla}_r\left[\frac{nm}{2}u^2\vec{u}\right]+\vec{\nabla}_r\left[\frac{5}{2}P\vec{u}\right]$$

$$=\vec{\nabla}_r\vec{Q}+\frac{nm}{2}\vec{\nabla}_r\left(u^2\right)\vec{u}+\frac{nmu^2}{2}\vec{\nabla}_r\left(\vec{u}\right)+\frac{5}{2}P\vec{\nabla}_r\vec{u}+\frac{5}{2}\vec{\nabla}_r P\vec{u}$$

$$n\vec{F}\left\langle\vec{v}\right\rangle=n\vec{F}\vec{u}+\vec{u}\vec{F}\underbrace{\left\langle\vec{c}\right\rangle}_{=0}=n\vec{F}\vec{u}$$

d'où

$$nm\vec{u}\frac{\partial\vec{u}}{\partial t}+\frac{nm}{2}\vec{u}\nabla u^2+\frac{3}{2}\frac{\partial P}{\partial t}+\vec{u}\vec{\nabla}\vec{P}+P\vec{\nabla}\vec{u}+\vec{\nabla}Q-n\vec{F}\vec{u}=\left\langle\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{2}nmv^2\right)\right\rangle \qquad (II-55)$$

Chapitre III

Evaluation du terme de collisions

III.1 Introduction

L'équation de Boltzmann sans collision ou sans second membre exprime la conservation du nombre de particules localisé dans un élément de volume $d\tau = d^3r\, d^3v$ à l'instant t et qui se trouvent à t+dt dans un autre élément de volume $d\tau' = d^3r'\, d^3v'$. La fonction de distribution ne doit pas varier puisque la conservation des volumes dans l'espace des phases et toujours vérifié, d'après le théorème de Liouville.

Lorsque les collisions interviennent, la fonction de distribution n'est plus constante, L'équation de Boltzmann admet un second membre qui tient compte de l'effet des collisions sur cette fonction.

Au cours de ce chapitre nous allons évaluer le terme de collision et montrer que ce second membre l'équation de Boltzmann dépend des sections efficaces de collisions, des vitesses et de l'angle de diffusion des particules.

III.2 Hypothèses

Nous allons maintenant voir comment l'équation de Boltzmann est modifiée si l'on tient compte des collisions entre les particules. Pour cela, nous allons faire les hypothèses simplificatrices suivantes :

- On suppose que le temps moyen entre deux collisions $\bar{t}$ est très grand devant le temps de collision t_c. Cela signifie que l'on peut toujours considérer un intervalle de temps Δt tel que :

$$t_c \ll \Delta t \ll \bar{t} \qquad \text{(III-1)}$$

Pour un gaz de particules neutres (atomes ou molécules), la trajectoire des particules entre deux collisions est rectiligne. La faible valeur de t_c signifie que les collisions peuvent être considérées comme instantanées. Le temps entre deux collisions, *t*, dépend de la densité du gaz ou, de manière équivalente, de $n(\mathbf{r},t)$. Ce temps ne doit néanmoins pas être trop long sinon le libre parcours moyen devient de l'ordre de grandeur des dimensions du récipient.

- Le gaz est suffisamment dilué pour que la probabilité de choc entre deux particules soit de beaucoup supérieure à celle entre 3, 4, ... particules.

- La section efficace est indépendante du champ moyen, *i.e.* de la force **F**.

- La distribution à une particule, $f(\mathbf{r},\mathbf{v},t)$, varie lentement à la fois dans l'espace et dans le temps pour que nous puissions la considérer comme une fonction continue.

- Chaque collision est indépendante des collisions précédentes. Ceci amène à négliger les corrélations entre les vitesses initiales $\mathbf{v}_1$ et $\mathbf{v}_2$ des particules. Cette hypothèse importante est connue sous le nom d'hypothèse de chaos moléculaire. Pour qu'elle soit valable, il faut que le libre parcours moyen des particules soit très grand devant la portée des forces intramoléculaires.

III.3 section efficace de collisions

Nous avons supposé jusqu'ici qu'il n'y avait pas de collisions entre les particules. Même si celles-ci sont rares, elles existent et sont responsables de l'évolution irréversible d'un système de particules vers l'équilibre. Nous allons maintenant voir comment ces collisions, peu nombreuses, modifient l'équation de Boltzmann sans collision que nous avons obtenue plus haut. Pour cela, considérons la collision de deux particules dont les vitesses initiales sont $\overrightarrow{v_1}$ et $\overrightarrow{v_2}$. Après le choc, leurs vitesses deviennent respectivement $\overrightarrow{v_1'}$ et $\overrightarrow{v_2'}$.

Soit $\sigma'(\overrightarrow{v_1}, \overrightarrow{v_2} \rightarrow \overrightarrow{v_1'}, \overrightarrow{v_2'})$ la section efficace associée à la collision. Nous supposerons que la durée du choc est extrêmement courte et que la collision est élastique. Les particules sont supposées ponctuelles et sans structure (il n'y a donc pas de possibilité d'exciter les états internes des particules et donc d'avoir des processus inélastiques).

Soient Φ le flux incident et N le nombre de particules cibles, le nombre de particules diffusées par unité de temps dans l'élément de volume $d^3v_1'd^3v_2'$ centré autour de $\overrightarrow{v_1'}$ et $\overrightarrow{v_2'}$ est égal à :

$$d^6n = \sigma'(\overrightarrow{v_1}, \overrightarrow{v_2} \rightarrow \overrightarrow{v_1'}, \overrightarrow{v_2'}) N\Phi \; d^3v_1'd^3v_2' \qquad \text{(III-2)}$$

Avant la collision, la vitesse du centre de masse vaut $\vec{V}$ et la vitesse relative des deux particules est égale à $\vec{v}_{\text{rel}}$. Après la collision, elles deviennent respectivement $\overrightarrow{V'}$ et $\overrightarrow{v'_{rel}}$. La conservation de l'énergie et de l'impulsion implique que :

$$\vec{V} = \overrightarrow{V'} \quad et \quad \left\|\vec{v}_{\text{rel}}\right\| = \left\|\overrightarrow{v'_{rel}}\right\| \;\; \text{ou} \;\; v_{\text{rel}} = v'_{rel} \qquad \text{(III-3)}$$

Dans une collision élastique, on a donc un changement de direction de la vitesse relative des deux particules mais v_{rel} et $\vec{V}$ restent inchangés. On peut montrer, en calculant le jacobien associé aux différents changements de variables que :

$$d^3v_1d^3v_2 = d^3v_{\text{rel}}d^3V = d^3v'_{rel}d^3V' = d^3v_1'd^3v_2' \qquad \text{(III-4)}$$

La section efficace σ est nulle lorsque les conditions (III-3) ne sont pas satisfaites. Cela peut se traduire en introduisant un produit de distributions de Dirac : $\delta\left(\vec{V} - \overrightarrow{V'}\right) \; \delta\left(v_{\text{rel}} - v'_{rel}\right)$

Le vecteur $\overrightarrow{\mathrm{v}'_{rel}}$ peut être exprimé en coordonnées sphériques (v_{rel}, θ', ϕ'). Les variables (θ', ϕ') définissent une direction. L'élément de volume qui leur est associé est l'angle solide élémentaire $d\Omega' = \sin\theta'\, d\theta'\, d\phi'$.

La collision entre les deux particules a pour effet de changer leur direction relative ($d\Omega \rightarrow d\Omega'$). Par conséquent, il est commode d'introduire la section efficace $\sigma(\mathrm{v}'_{\mathrm{rel}})$ associée à la déflexion dans l'angle solide $d\Omega'$.

Le nombre de particules qui sont défléchies par unité de temps dans $d\Omega$ est donné par :

$$d^2 n = \sigma(\Omega')N\Phi\ d\Omega' \qquad \text{(III-5)}$$

La relation entre $\sigma(\Omega')$ et $\sigma'(\overrightarrow{\mathrm{v}_1}, \overrightarrow{\mathrm{v}_2} \rightarrow \overrightarrow{\mathrm{v}'_1}, \overrightarrow{\mathrm{v}'_2})$ peut être déterminée en écrivant :

$$\int \sigma(\Omega')\ d\Omega' = \int \sigma'(\overrightarrow{\mathrm{v}_1}, \overrightarrow{\mathrm{v}_2} \rightarrow \overrightarrow{\mathrm{v}'_1}, \overrightarrow{\mathrm{v}'_2})\ d^3\mathrm{v}'_1 d^3\mathrm{v}'_2 = \int \sigma'\ \mathrm{d}^3\mathrm{v}'_{rel} d^3V' \qquad \text{(III-6)}$$

ou

$$\int \sigma(\Omega')\ d\Omega' = \int_{\Omega'} \int_{\mathrm{v}'_{rel}} \int_{V'} \sigma'\ \mathrm{v}'^2_{rel} d\mathrm{v}'_{rel} d^3V' d\Omega'$$

Ce qui conduit à :

$$\sigma(\Omega')\ = \int_{\mathrm{v}'_{rel}} \int_{\overrightarrow{V'}} \sigma'(\overrightarrow{\mathrm{v}_1}, \overrightarrow{\mathrm{v}_2} \rightarrow \overrightarrow{\mathrm{v}'_1}, \overrightarrow{\mathrm{v}'_2})\ \mathrm{v}'^2_{rel} d\mathrm{v}'_{rel} d^3V' \qquad \text{(III-7)}$$

Nous avons utilisé le fait qu'en coordonnées sphériques, $\mathrm{d}^3\mathrm{v}'_{rel} = \mathrm{v}'^2_{rel} d\mathrm{v}'_{rel} d\Omega'$. Dans l'expression (III-7), l'intégration se fait sur 4 variables : les trois composantes associées à $\overrightarrow{V'}$, la vitesse d'entraînement du centre de masse, et le module v'_{rel} de la vitesse relative.

Il convient de se rappeler que σ est nulle lorsque les conditions (III-3) ne sont pas satisfaites. C'est ce qui est exprimé dans l'équation (III-7) en introduisant les distributions de Dirac :

$$\sigma(\Omega')\ = \int_{v_{rel}} \int_{V} \sigma'\ \ \delta\left(\vec{V} - \overrightarrow{V'}\right)\ \delta\left(\mathrm{v_{rel}} - \mathrm{v}'_{rel}\right) d\mathrm{v}'_{rel} d^3V \qquad (III-8)$$

III.4 Propriétés des sections efficaces

Les interactions entre particules ont pour origine l'interaction électromagnétique. Celle-ci implique un certain nombre de symétries pour la section efficace $\sigma'(\overrightarrow{v_1},\overrightarrow{v_2} \rightarrow \overrightarrow{v_1'},\overrightarrow{v_2'})$ que nous allons maintenant examiner. Nous supposerons que l'interaction entre les particules ne dépend que du potentiel moyen $U(\mathbf{r})$.

- Les équations du mouvement sont invariantes par renversement du temps ($t \rightarrow -t$). Au cours de cette transformation, où l'on « remonte » le temps, les vitesses changent de signe $(\vec{v} \rightarrow -\vec{v})$ On doit donc avoir la relation :

$$\sigma'(\overrightarrow{v_1},\overrightarrow{v_2} \rightarrow \overrightarrow{v_1'},\overrightarrow{v_2'})\,d^3v_1'd^3v_2' = \sigma'(-\overrightarrow{v_1'},-\overrightarrow{v_2'} \rightarrow -\overrightarrow{v_1},-\overrightarrow{v_2})\,d^3v_1d^3v_2$$

Ce qui, compte tenu de (65) donne :

$$\sigma'(\overrightarrow{v_1},\overrightarrow{v_2} \rightarrow \overrightarrow{v_1'},\overrightarrow{v_2'}) = \sigma'(-\overrightarrow{v_1'},-\overrightarrow{v_2'} \rightarrow -\overrightarrow{v_1},-\overrightarrow{v_2}) \qquad (III-9)$$

- Les équations du mouvement sont également invariantes par l'opération de parité, *i.e.* par changement de $(\vec{r} \rightarrow -\vec{r})$. Dans cette transformation, les coordonnées changent de signe mais pas le temps *t*. Il s'ensuit que les vitesses changent de signe. Cette invariance se traduit par :

$$\sigma'(\overrightarrow{v_1},\overrightarrow{v_2} \rightarrow \overrightarrow{v_1'},\overrightarrow{v_2'}) = \sigma'(-\overrightarrow{v_1},-\overrightarrow{v_2} \rightarrow -\overrightarrow{v_1'},-\overrightarrow{v_2'}) \qquad (III-10)$$

- Enfin, les équations du mouvement sont invariantes lors du produit des transformations précédentes (renversement du temps × parité). C'est ce que l'on appelle la collision « inverse ». La réaction inverse de celle où les particules ont initialement les vitesses v_1'et $\mathbf{v}_2$ et les vitesses finales $\mathbf{v}_1$ et $\mathbf{v}_2$.

Cette loi d'invariance se traduit par la relation :

$$\sigma'(\overrightarrow{v_1},\overrightarrow{v_2} \to \overrightarrow{v_1'},\overrightarrow{v_2'}) = \sigma'(\overrightarrow{v_1'},\overrightarrow{v_2'} \to \overrightarrow{v_1},\overrightarrow{v_2}) \qquad (III-11)$$

Ces relations de symétrie nous seront utiles pour simplifier le terme de collisions de l'équation de Boltzmann.

III.5 Détermination du terme de collisions

L'équation de Boltzmann sans collision, Df = 0, exprime la conservation du nombre de particules dans un élément de volume de l'espace de phase qui se déplace au cours du temps ($d^3r\ d^3\mathrm{v} \to d^3r'\ d^3\mathrm{v}'$) lorsque $t \to t' = t + dt$).

À cause des collisions, certaines particules vont sortir de cet élément de volume et d'autres y entrer. En effet, une particule dans $d^3r\ d^3\mathrm{v}$ peut, après une collision avec une autre particule qui n'appartient pas à cet élément de volume, en sortir ($d^3r\ d^3\mathrm{v} \to d^3r'\ d^3\mathrm{v}'$). De même, la collision de particules extérieures à $d^3r\ d^3\mathrm{v}$ peut conduire à une particule dans cet élément de volume ($d^3r' d^3\mathrm{v}' \to d^3r\ d^3\mathrm{v}$).

Soit $I^{(-)}$ le terme de perte et $I^{(+)}$ le terme de gain par unité de volume et de vitesse.

L'équation cinétique tenant compte des collisions à deux corps est dénommée équation de Boltzmann. Elle s'écrit sous la forme compacte suivante :

$$Df(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},\mathrm{t}) = I^{(+)} - I^{(-)}$$

Nous allons maintenant évaluer les termes de perte et de gain. Considérons pour cela les éléments de volume d^3**r** centré en $\vec{r}$ et d^3**v** centré en $\vec{\mathrm{v}}$. Les quantités d^3**r** et d^3**v** sont supposés infiniment petites à l'échelle macroscopique. L'hypothèse que nous avons faite sur la variation

lente de la fonction de distribution $f(\vec{r},\vec{v},t)$ est nécessaire pour qu'elle soit pratiquement constante dans d^3**r** ou d^3**v**. Nous supposons les particules ponctuelles et l'interaction entre celles-ci de très courte portée. Cela signifie que les collisions ne se produiront que si les particules sont pratiquement au même point. Les collisions qui nous intéressent vont donc toutes se produire dans l'élément de volume d^3**r**.
Dans l'élément de volume d^3**r**d^3**v** les termes de perte et de gain seront respectivement I$^{(-)}$d^3**r** d^3**v** et I$^{(+)}$d^3**r** d^3**v**

III.5.1 Terme de perte I$^{(-)}$

Considérons l'élément de volume d^3**r** d^3**v**. La diminution du nombre de particules dans cet élément de volume provient de collisions entre les particules de vitesse $\vec{v}$ et celles ayant une vitesse $\vec{v}_1$ quelconque. Les particules ont, après la collision, les vitesses $\vec{v}\,'$ .et $\vec{v_1'}$. le nombre de particules par unité de temps qui sont telles que ($d^3r\ d^3v \to d^3r'\ d^3v'$) est donné par :

$$\left[\sigma'(\vec{v},\vec{v_1}\to\vec{v'},\vec{v_1'})d^3v'd^3v_1'\right]\left[f(\vec{r},\vec{v_1},t)d^3rd^3v_1\right]\left[\left\|\vec{v}-\vec{v}_1\right\|f(\vec{r},\vec{v},t)d^3v\right] \qquad (III-12)$$

- Le premier terme entre crochets représente le nombre de molécules par unité de temps qui subissent une collision de type $(\vec{v},\vec{v_1}\to\vec{v'},\vec{v_1'})$ pour un flux incident unité et pour une seule molécule cible.

- Le deuxième terme représente le nombre de particules cibles (ici les particules de vitesse $\vec{v}_1$).

- Le troisième terme représente le flux relatif de particules de vitesse $\vec{v}$ sur les particules de vitesse $\vec{v}_1$.

Nous avons supposé ci-dessus que les particules de vitesse $\vec{\mathrm{v}}$ étaient le faisceau incident et que les particules de vitesse $\vec{\mathrm{v}}_1$ étaient la cible. Une supposition inverse ne changerait pas le résultat. On obtiendrait en effet :

$$\left[\sigma'(\vec{\mathrm{v}},\vec{\mathrm{v}}_1 \to \vec{\mathrm{v}}',\vec{\mathrm{v}}_1')d^3\mathrm{v}'d^3\mathrm{v}_1'\right]\left[f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)d^3rd^3\mathrm{v}\right]\left[\left\|\vec{\mathrm{v}}-\vec{\mathrm{v}}_1\right\| f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}}_1,t)d^3\mathrm{v}_1\right]$$

Le terme de perte est obtenu en intégrant sur toutes les vitesses v', v'$_1$ et v$_1$ en respectant les lois de conservation de l'énergie et de l'impulsion au cours de la collision :

$$I^{(-)}d^3rd^3\mathrm{v} = \int_{\mathrm{v}'}\int_{\mathrm{v}_1'}\int_{\mathrm{v}_1}\left[\sigma'(\vec{\mathrm{v}},\vec{\mathrm{v}}_1 \to \vec{\mathrm{v}}',\vec{\mathrm{v}}_1')d^3\mathrm{v}'d^3\mathrm{v}_1'\right]\left[f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}}_1,t)d^3rd^3\mathrm{v}_1\right]\left[\left\|\vec{\mathrm{v}}-\vec{\mathrm{v}}_1\right\| f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)d^3\mathrm{v}\right] \quad (III-13)$$

Nous avons le terme de perte sous la forme $I^{(-)}d^3rd^3\mathrm{v}$ car nous considérons l'élément $d^3rd^3\mathrm{v}$ de l'espace coordonnées-vitesses. Nous avions fait de même pour déduire l'équation de Boltzmann sans terme de collision.

III.5.2 Terme de gain $I^{(+)}$

Le calcul du terme de gain se fait de manière analogue. On considère l'élément de volume $d^3\mathbf{r}\ d^3\mathbf{v}$ et on calcule le nombre de particules qui entrent, par unité de temps, dans $d^3\mathbf{v}$ après collision. Pour cela, il faut d'abord calculer le nombre de particules par unité de temps qui conduisent, après collision dans $d^3\mathbf{r}$, à une particule ayant une vitesse **v** centrée dans $d\mathbf{v}$. Nous allons pour cela considérer le schéma $(\vec{\mathrm{v}}',\vec{\mathrm{v}}_1' \to \vec{\mathrm{v}},\vec{\mathrm{v}}_1)$. Ce nombre, $I^{(+)}d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{v}$ est donné par :

$$\left[\sigma'(\vec{\mathrm{v}}',\vec{\mathrm{v}}_1' \to \vec{\mathrm{v}},\vec{\mathrm{v}}_1)d^3\mathrm{v}d^3\mathrm{v}_1\right]\left[f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}}_1',t)d^3rd^3\mathrm{v}_1'\right]\left[\left\|\vec{\mathrm{v}}'-\vec{\mathrm{v}}_1'\right\| f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}}',t)d^3\mathrm{v}'\right] \quad (III-14)$$

- Le premier terme entre crochet représente le nombre de particules, par unité de temps, par unité de flux incident et pour une particule cible, qui conduisent à la collision de deux particules selon $(\vec{\mathrm{v}}',\vec{\mathrm{v}}_1' \to \vec{\mathrm{v}},\vec{\mathrm{v}}_1)$.

- Le deuxième terme correspond au nombre de particules cibles (ici les particules de vitesse $\vec{\mathrm{v}}_1'$)

- Le troisième terme correspond au flux incident (ici les projectiles sont les particules de vitesse $\overrightarrow{\mathrm{v}'}$)

Le terme de gain est obtenu en intégrant sur toutes les vitesses v', v'$_1$ et v$_1$ en respectant les lois de conservation de l'énergie et de l'impulsion au cours de la collision :

$$I^{(+)}d^3rd^3\mathrm{v} = \int_{\mathrm{v}_1}\int_{\mathrm{v}'}\int_{\mathrm{v}_1'}\left[\sigma'(\overrightarrow{\mathrm{v}'},\overrightarrow{\mathrm{v}_1'} \to \vec{\mathrm{v}},\overrightarrow{\mathrm{v}_1})d^3\mathrm{v}d^3\mathrm{v}_1\right]\left[f(\vec{r},\overrightarrow{\mathrm{v}_1'},t)d^3rd^3\mathrm{v}_1'\right]\left[\left\|\overrightarrow{\mathrm{v}'}-\overrightarrow{\mathrm{v}_1'}\right\| f(\vec{r},\overrightarrow{\mathrm{v}'},t)d^3\mathrm{v}'\right] \quad (III-15)$$

III.5.3 Terme total de collisions

Nous avons vu plus haut que l'invariance des lois physiques qui gouvernent la collision conduit à ce que les sections efficaces directes et inverses sont égales. Ceci se traduit dans notre cas par :

$$\sigma'(\vec{\mathrm{v}},\overrightarrow{\mathrm{v}_1} \to \overrightarrow{\mathrm{v}'},\overrightarrow{\mathrm{v}_1'}) = \sigma'(\overrightarrow{\mathrm{v}'},\overrightarrow{\mathrm{v}_1'} \to \vec{\mathrm{v}},\overrightarrow{\mathrm{v}_1})$$

Les vitesses relatives sont reliées entre elles par la loi de conservation de l'énergie:

$$\mathrm{v}_{\mathrm{rel}} = \mathrm{v}'_{rel}$$

Posons, pour alléger les notations :

$$f = f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t), \qquad f_1 = f(\vec{r},\overrightarrow{\mathrm{v}_1},t)$$
$$f' = f(\vec{r},\overrightarrow{\mathrm{v}'},t), \qquad f_1' = f(\vec{r},\overrightarrow{\mathrm{v}_1'},t)$$

Le terme de collisions devient alors :

$$I^{(+)} - I^{(-)} = \int_{\mathrm{v}'}\int_{\mathrm{v}_1'}\int_{\mathrm{v}_1} \mathrm{v}_{rel}\left(f'f_1' - f f_1\right)\sigma'(\vec{\mathrm{v}},\overrightarrow{\mathrm{v}_1} \to \overrightarrow{\mathrm{v}'},\overrightarrow{\mathrm{v}_1'})d^3\mathrm{v}'d^3\mathrm{v}_1'd^3\mathrm{v}_1 \qquad (III-16)$$

Finalement, l'équation de Boltzmann s'écrit :

$$Df(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t) = \frac{\partial f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)}{\partial t} + \vec{\mathrm{v}}.\frac{\partial f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)}{\partial \vec{r}} + \frac{\overrightarrow{F_1}}{m}.\frac{\partial f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)}{\partial \vec{\mathrm{v}}} = \int_{\mathrm{v}'}\int_{\mathrm{v}_1'}\int_{\mathrm{v}_1} \mathrm{v}_{rel}\left(f'f_1' - f f_1\right)\sigma'(\vec{\mathrm{v}},\overrightarrow{\mathrm{v}_1} \to \overrightarrow{\mathrm{v}'},\overrightarrow{\mathrm{v}_1'})d^3\mathrm{v}'d^3\mathrm{v}_1'd^3\mathrm{v}_1 \qquad (III-17)$$

Le terme de collisions peut être simplifié en faisant intervenir la section efficace différentielle $\sigma(\Omega')$ plutôt que $\sigma'(\vec{\mathrm{v}},\overrightarrow{\mathrm{v}_1} \to \overrightarrow{\mathrm{v}'},\overrightarrow{\mathrm{v}_1'})$.

Pour cela on passe des variables $\left(\overrightarrow{v'}, \overrightarrow{v_1'}\right)$ aux variables $\left(\overrightarrow{V'}, \overrightarrow{v_{rel}'}\right)$. L'intégrale multiple relative à ces variables devient alors, compte tenu des relations (III-4) :

$$I^{(+)} - I^{(-)} = \int_{V'}\int_{v_{rel}'}\int_{v_1} v_{rel}\left(f' f_1' - f\ f_1\right)\sigma'(\vec{v}, \overrightarrow{v_1} \to \overrightarrow{v'}, \overrightarrow{v_1'})d^3V' d^3v_{rel}' d^3v_1$$

Or $$d^3v_{rel}' = v_{rel}'^2 dv_{rel}' d\Omega'$$

$$I^{(+)} - I^{(-)} = \int_{\Omega}\int_{V'}\int_{v_{rel}'}\int_{v_1} v_{rel}\left(f' f_1' - f\ f_1\right)\sigma'(\vec{v}, \overrightarrow{v_1} \to \overrightarrow{v'}, \overrightarrow{v_1'})v_{rel}'^2 dv_{rel}' d^3V d\Omega' d^3v_1 \qquad (III-18)$$

$$I^{(+)} - I^{(-)} = \int_{v_1}\int_{\Omega} d\Omega' d^3v_1 \int_{V'}\int_{v_{rel}'} v_{rel}\left(f' f_1' - f\ f_1\right)\sigma'(\vec{v}, \overrightarrow{v_1} \to \overrightarrow{v'}, \overrightarrow{v_1'})v_{rel}'^2 dV' dv_{rel}' \qquad (III-19)$$

Sachant que :

$$\sigma(\Omega') = \int_{v_{rel}'}\int_{\overrightarrow{V'}} \sigma'(\vec{v}, \overrightarrow{v_1} \to \overrightarrow{v'}, \overrightarrow{v_1'})\ v_{rel}'^2 dv_{rel}' d^3V'$$

En tenant compte de ceci, voyons comment les termes de collision $I^{(-)}$ et $I^{(-)}$ se transforment :

$$I^{(+)} - I^{(-)} = \int_{v_1}\int_{\Omega'} \sigma(\Omega') v_{rel}\left(f' f_1' - f\ f_1\right) d\Omega' d^3v_1 \qquad (III-20)$$

Pour $I^{(-)}$ le problème ne se pose pas car f et f_1 dépendent de $\vec{v}$ et $\overrightarrow{v_1}$ non de $\overrightarrow{V'}$ **et** $\overrightarrow{v_{rel}'}$**.** La situation pour $I^{(+)}$ est un peu plus complexe car f et f_1 dépendent de $\overrightarrow{v'}$ **et** $\overrightarrow{v_1'}$. Toutefois, on peut remarquer que f' et f_1' ne peuvent dépendre explicitement de $\overrightarrow{V'}$ car tout mouvement de translation d'ensemble du système ne doit pas en changer ses propriétés. D'autre part, f' et f_1' ne peuvent pas dépendre explicitement du module de la vitesse relative $\overrightarrow{v_{rel}'}$. En effet, les particules associées sont complètement décorrélées par suite de l'hypothèse de chaos moléculaire.

Ce qui conduit à l'équation de Boltzmann :

$$Df(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)=\frac{\partial f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)}{\partial t}+\vec{\mathrm{v}}.\frac{\partial f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)}{\partial \vec{r}}+\frac{\vec{F_1}}{m}.\frac{\partial f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)}{\partial \vec{\mathrm{v}}}=\int_{\mathrm{v}_1}\int_{\Omega'}\sigma(\Omega')\mathrm{v}_{rel}\left(f'\,f_1'-f\,f_1\right)d\Omega'\,d^3\mathrm{v}_1 \qquad (III-21)$$

L'équation de Boltzmann est une équation *intégro-différentielle non linéaire* que l'on ne peut pas résoudre analytiquement dans le cas général. On peut néanmoins en trouver des solutions numériques approchées mais ces études sont très complexes. L'équation de Boltzmann n'est pas invariante par renversement du temps ce qui signifie qu'elle décrit un processus irréversible. Ceci peut paraître très étonnant car elle est basée sur les équations du mouvement de la mécanique classique qui sont réversibles. Cette irréversibilité a fait le succès de l'équation de Boltzmann mais a aussi posé de nombreux problèmes de compréhension dont tous ne sont pas encore résolus à l'heure actuelle.

III.6 Distribution d'équilibre

Nous allons considérer un système homogène en l'absence de champ extérieur et déduire la distribution d'équilibre. Lorsque l'équilibre est atteint, on a :

$$Df(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)=\frac{\partial f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)}{\partial t}+\vec{\mathrm{v}}.\frac{\partial f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)}{\partial \vec{r}}+\frac{\vec{F_1}}{m}.\frac{\partial f(\vec{r},\vec{\mathrm{v}},t)}{\partial \vec{\mathrm{v}}}=0$$

ce traduit par :

$$\int_{\mathrm{v}_1}\int_{\Omega'}\sigma(\Omega')\mathrm{v}_{rel}\left(f'\,f_1'-f\,f_1\right)d\Omega'\,d^3\mathrm{v}_1=0 \qquad (III-22)$$

soit

$$f'\,f_1'=f\,f_1$$

ou $$\log f'+\log f_1'=\log f+\log f_1 \qquad (III-23)$$

Ceci revient à dire que Logf est une quantité conservée dans la collision de deux particules. Or, nous savons qu'au cours d'une collision élastique entre deux particules, 5 quantités sont conservées entre l'état initial et l'état final :

- toute constante, la masse *m* par exemple,

- l'impulsion $m\vec{\mathrm{v}}$ $(m\vec{\mathrm{v}}+m\vec{\mathrm{v}}_1=m\vec{\mathrm{v}}'+m\vec{\mathrm{v}}_1')$), soit 3 composantes mv_x, mv_y et mv_z,
- l'énergie cinétique.

Il s'ensuit que Log*f* ne peut être qu'une combinaison linéaire de ces 5 invariants :

$$\log f \;= A''+\vec{B}m\vec{\mathrm{v}}-D\frac{1}{2}m\mathrm{v}^2 \qquad (III-24)$$

où *A*, *D* sont des scalaires et **B** un vecteur. Ceci permet d'écrire *f* sous la forme :

$$f \;= A'\exp\left(\vec{B}m\vec{\mathrm{v}}-D\frac{1}{2}m\mathrm{v}^2\right)=A\exp\left[-\frac{mD}{2}\left(\vec{\mathrm{v}}-\frac{\vec{B}}{D}\right)^2\right] \qquad (III-25)$$

où *A* et *A* sont aussi des constantes définies à partir des précédentes. Le nombre moyen de particules par unité de volume et la vitesse moyenne (ou hydrodynamique) sont définis par :

$$n=\int fd^3v \quad \text{et} \quad \mathrm{n}\vec{u}=\int\vec{\mathrm{v}}fd^3v$$

Ceci nous donne, après intégration, les deux relations suivantes :

$$n=A\left(\frac{2\pi}{mD}\right)^{3/2} \quad \text{et} \quad \mathrm{n}\vec{u}=\frac{A\vec{B}}{D}\left(\frac{2\pi}{mD}\right)^{3/2} \qquad (III-26)$$

Doù : $\vec{u}=\dfrac{\vec{B}}{D}$ $\qquad (III-27)$

Par conséquent :

$$f \;=n\left(\frac{mD}{2\pi}\right)^{3/2}\exp\left[-\frac{mD}{2}\left(\vec{\mathrm{v}}-\vec{u}\right)^2\right] \qquad (III-28)$$

Nous allons définir la température du gaz à partir de l'énergie cinétique moyenne des particules en utilisant le théorème d'équipartition de l'énergie. Toutefois, il convient de noter que la vitesse des particules qu'il faut utiliser n'est pas $\vec{\mathrm{v}}$ mais la vitesse intrinsèque $\vec{w}=\vec{\mathrm{v}}-\vec{u}$

La raison provient de ce que la vitesse hydrodynamique ne correspond qu'à un mouvement d'entraînement d'ensemble du système alors que $\vec{w}$

est la vitesse de nature aléatoire qui est responsable de la température du gaz. Pour s'en convaincre il suffit d'imaginer que l'on soumette le gaz à un mouvement de translation d'ensemble. La vitesse **u** augmente mais la température du gaz reste la même. Par conséquent :

$$\frac{1}{2} m\overline{(\vec{u} - \vec{\mathrm{v}})^2} = \frac{1}{2} m\overline{w^2} = \frac{3}{2} KT \qquad (III - 28)$$

$$3n \frac{K_B T}{m} = \int (\vec{u} - \vec{\mathrm{v}})^2 \, f d^3\mathrm{v} \qquad (III - 29)$$

Soit

$$D = \frac{1}{K_B T}$$

d'où

$$f = n \left(\frac{m}{2\pi K_B T} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mw^2}{2K_B T} \right) \qquad (III - 30)$$

C'est la distribution de Maxwell dont nous avons déjà parlé dans le chapitre 8. La distribution de Maxwell est donc la solution d'équilibre de l'équation de Boltzmann. Cette dernière décrit donc l'évolution vers l'équilibre statistique d'un gaz dilué.