

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 utilisée 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 l'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 l'évolution 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 l'équation de Liouville.

II.2 Equation de Liouville

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

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

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 :

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

Avec
$$D(\vec{r}_i, \vec{v}_i, t) = m^{3N} \rho(\mathbf{q}_i, \mathbf{p}_i, t) \quad (\text{II-3})$$

$\vec{F}_i + \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij}$ 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 l'une des particules, C'est-à-dire quand on a :

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

Cette identité est imposée par l'indiscernabilité 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 l'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 l'extrémité est à l'intérieur de l'élément 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, \dots, d^3r_N et sur tous les espaces des vitesses d^3v_2, \dots, d^3v_N , ce qui s'écrit :

$$dp_1 = d^3r_1 d^3v_1 \int_{r_i} \int_{v_i} D(\vec{r}_i, \vec{v}_i, t) \prod_{i=2}^N d^3r_i d^3v_i \quad (\text{II-5})$$

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 l'élément de volume d^3v_1 . Ce nombre est égal à la probabilité, valable pour l'une quelconque des particules, multipliée par N :

$$dN_1 = d^3r_1 d^3v_1 N \int_{r_i} \int_{v_i} D(\vec{r}_i, \vec{v}_i, t) \prod_{i=2}^N d^3r_i d^3v_i \quad (\text{II-6})$$

Qui peut se mettre suivante :

$$dN_1 = f_1(\vec{r}_1, \vec{v}_1, t) d^3r_1 d^3v_1 \quad (\text{II-7})$$

En posant :

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

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 l'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 l'espace des vitesses :

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

II.4 Fonction de distribution et densité doubles

Considérons maintenant deux éléments de volume d^3r_1 et d^3r_2 dans l'espace ordinaire, et deux éléments de volume d^3v_1 et d^3v_2 dans l'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_2 avec l'extrémité 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 :

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

En posant :

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

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

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

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

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

N étant supposé très élevé on a donc approximativement :

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

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 :

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

et

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

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

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

II.5 Système d'équations de BBGKY

II.5.1 Equation d'évolution de la fonction f_1

En multipliant l'équation de Liouville (II-2) par N et en l'intégrant sur les variables $\vec{r}_2, \vec{v}_2, \vec{r}_3, \vec{v}_3, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_N$, on obtient l'équation d'évolution de f_1 . Ce calcul

conduit au résultat suivant :

$$\frac{dD}{dt} = \frac{\partial D}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \vec{v}_i \cdot \frac{\partial D}{\partial \vec{r}_i} + \sum_{i=1}^N \frac{\vec{F}_i + \sum_{j \neq i} \vec{F}_{ij}}{m} \cdot \frac{\partial D}{\partial \vec{v}_i} = 0$$

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \frac{\vec{F}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} + \int \frac{\vec{F}_{12}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1} d^3 r_2 d^3 v_2 = 0 \quad (\text{II-17})$$

On peut pour discuter la signification des divers termes de cette équation

la récrire sous la forme :

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

avec

$$B(f_{12}) = - \int \frac{\vec{F}_{12}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1} d^3 r_2 d^3 v_2 \quad (\text{II-19})$$

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

- **Le premier terme**, $\vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial r_1}$ exprime l'influence des phénomènes de diffusion ; \vec{v}_1 est la vitesse des molécules et $\frac{\partial f_1}{\partial r_1}$ est le gradient de la fonction de distribution f_1 dans l'espace des positions.

- **Le deuxième terme**, $\frac{\vec{F}_1}{m} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1}$, 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 l'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} :

$$\begin{aligned} & \frac{\partial f_{12}}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{r}_1} + \vec{v}_2 \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{r}_2} + \frac{\vec{F}_1 + \vec{F}_{12}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_1} + \frac{\vec{F}_2 + \vec{F}_{21}}{m} \cdot \frac{\partial f_{12}}{\partial \vec{v}_2} \\ & + \int \frac{\vec{F}_{13}}{m} \cdot \frac{\partial f_{123}}{\partial \vec{v}_1} d^3 r_3 d^3 v_3 + \int \frac{\vec{F}_{23}}{m} \cdot \frac{\partial f_{123}}{\partial \vec{v}_2} d^3 r_3 d^3 v_3 = 0 \end{aligned} \quad (\text{II-20})$$

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 connaît f_{12} et la deuxième de déterminer f_{12} que si on connaît f_{123} . On pourrait écrire une équation d'évolution pour f_{123} , mais elle ferait apparaître 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 l'utiliser pratiquement, il faut l'arrêter à un stade quelconque, en faisant une hypothèse simplificatrice sur l'une des fonctions de distribution, d'ordre plus ou moins élevé. On arrive ainsi à obtenir un système déterminé.

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 l'équation de Boltzmann et l'équation de Vlasov : l'équation de Boltzmann s'applique aux gaz neutres ou faiblement ionisés (collisions binaires dominantes) et l'équation 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 l'écrire sous la forme :

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

L'équation ainsi écrite est l'équation 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 l'évolution 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 l'étude 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 :

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

Cette approximation n'est valable que si les particules 1 et 2 sont assez éloignées l'une de l'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 :

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \frac{q}{m} (\vec{E}_1 + \vec{v}_1 \wedge \vec{B}) \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} = -B(f_{12}) \quad (\text{II-23})$$

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

$$B(f_{12}) = -\frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} \int n_2 \frac{\vec{F}_{12}}{m} d^3 r_2 = -\frac{q}{m} \vec{E}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} \quad (\text{II-24})$$

\vec{E}_1 étant le champ de charge d'espace défini par la formule :

$$\vec{E}_1 = \int n_2 \vec{F}_{12} d^3 r_2 \quad (\text{II-25})$$

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

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \vec{v}_1 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{r}_1} + \frac{q}{m} (\vec{E}_1 + \vec{E}_1 + \vec{v}_1 \wedge \vec{B}) \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \vec{v}_1} = 0 \quad (\text{II-26})$$

L'équation ainsi décrite est l'équation de Vlasov. Elle est formellement identique à l'équation 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.