Physique statistique avancée II

Séance 4: Interprétation physique du théorème « H »; Dérivation de l'équation de Boltzmann à partir de la hiérarchie BBGKY

1. Discussion sur le théorème « H » (voir, par exemple, le chapitre 4.4 du livre de Kerson Huang)
2. Dérivation de l'équation de Boltzmann à partir de la hiérarchie « BBGKY »
3. Discussion

Références:

Kerson Huang, « *Statistical Mechanics* », 2nd ed. (Wiley & Sons, New York, 1987)

Gregory H. Wannier, « Statistical Physics », (Wiley & Sons, New York, 1966)

http://itp.epfl.ch/page21326.html

- Considérons pour un instant une écriture symbolique aux différences finies de la première équation de la hiérarchie « BBGKY »

$$\frac{\Delta f^{(1)}}{\Delta t} : -\left(\frac{\mathbf{p}}{m} \underset{\substack{\downarrow \\ \frac{1}{\tau_s}}}{\frac{1}{\Delta r}} + \underset{\substack{\downarrow \\ \frac{1}{\tau_e}}}{\frac{\mathbf{F}}{\Delta p}} \right) \Delta f^{(1)} - \sum \Delta r' \Delta p' \underset{\substack{\downarrow \\ \frac{1}{\tau_c}}}{\frac{\mathbf{K}}{\Delta p}} \Delta f^{(2)}$$

- Les trois termes définissent trois échelles de temps pour la dépendance temporelle de

τ_s Temps de vol sur une distance sur laquelle la $f^{(1)}$ varie significativement.

τ_e Temps de vol sur une distance sur laquelle le potentiel externe varie significativement.

τ_c Temps de durée d'une collision.

- Les hypothèses de gaz extrêmement dilué impliquent la relation suivante

$$\tau_c \ll \tau_s \ll \tau_e$$

- Le terme de collision contient encore une somme sur l'espace de phase

$$\sum \Delta r' \Delta p' \frac{\mathbf{K}}{\Delta p} \Delta f^{(2)}$$

- Pour un système dilué, l'ordre de grandeur de $f^{(2)}$ peut s'exprimer par

$$f^{(2)} \sim f^{(1)} \cdot f^{(1)}$$

et par conséquent, $$\Delta f^{(2)} \sim 2 f^{(1)} \cdot \Delta f^{(1)}$$

- La somme est effectuée sur la région de l'espace où l'interaction se produit. Si nous introduisons un rayon d'interaction a nous pouvons expliciter la troisième échelle de temps comme

$$\sum_{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|<a} \Delta r' \Delta p' \frac{\mathbf{K}}{\Delta p} f^{(1)} \Delta f^{(1)} \sim \frac{na^3}{\tau_c} \Delta f^{(1)}$$

- Pour un système très dilué $na^3 \ll 1$. Le terme de collision détermine donc une échelle de temps beaucoup plus longue que la durée d'une collision τ_c .

- Nous pouvons effectuer la même analyse des échelles de temps pour la deuxième équation

$$\frac{\Delta f^{(2)}}{\Delta t} : -\left(\underbrace{\frac{\mathbf{p}}{m}\frac{1}{\Delta r}}_{\frac{1}{\tau_s}} + \underbrace{\frac{\mathbf{F}}{\Delta p}}_{\frac{1}{\tau_e}} + \underbrace{\frac{\mathbf{K}}{\Delta p}}_{\frac{1}{\tau_c}}\right)\Delta f^{(2)} - \underbrace{\sum \Delta r''\Delta p''\frac{\mathbf{K}}{\Delta p}\Delta f^{(3)}}_{\frac{na^3}{\tau_c}\Delta f^{(2)}}$$

où nous avons exprimé l'ordre de grandeur de $f^{(3)}$ par

$$f^{(3)} \sim f^{(1)} \cdot f^{(2)}$$

- La dynamique de $f^{(2)}$ est gouvernée par τ_c déjà dans le terme de dérive. Nous avons déjà vu que le temps d'une collision défini la plus courte échelle de temps du système. Puisque

$$\frac{na^3}{\tau_c} \ll \frac{1}{\tau_c}$$

nous allons négliger le terme de collision dans la deuxième équation. Ceci nous permet de « tronquer » la hiérarchie « BBGKY » au deuxième ordre, en première approximation.

- Nous avons ainsi un set d'équations fermé:

$$
\begin{cases}
\dfrac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + \dfrac{\mathbf{p}_1}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}_1} f^{(1)} + \mathbf{F}(\mathbf{r}_1)\cdot\nabla_{\mathbf{p}_1} f^{(1)} \\
\qquad = -\dfrac{1}{2}\displaystyle\int d^3 r_2 d^3 p_2\, \mathbf{K}_{1,2}\cdot\left(\nabla_{\mathbf{p}_1} - \nabla_{\mathbf{p}_2}\right) f^{(2)} \\
\dfrac{\partial f^{(2)}}{\partial t} + \Bigg[\dfrac{\mathbf{p}_1}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}_1} + \dfrac{\mathbf{p}_2}{m}\cdot\nabla_{\mathbf{r}_2} + \mathbf{F}(\mathbf{r}_1)\cdot\nabla_{\mathbf{p}_1} + \mathbf{F}(\mathbf{r}_2)\cdot\nabla_{\mathbf{p}_2} \\
\qquad + \dfrac{1}{2}\mathbf{K}_{1,2}\cdot\left(\nabla_{\mathbf{p}_1} - \nabla_{\mathbf{p}_2}\right)\Bigg] f^{(2)} = 0
\end{cases}
$$

Ces équations représentent formellement une théorie cinétique à l' ordre d'approximation suivant à celui qui donne l'équation de Boltzmann.

- Pour obtenir l'équation de Boltzmann nous allons devoir faire une autre considération sur les échelles de temps

- La plus courte échelle de temps dans l'équation pour $f^{(2)}$ est donnée par τ_c . En comparaison, l'échelle de temps de $f^{(1)}$ est beaucoup plus longue pour un gaz dilué.

- Nous allons pouvoir supposer qu'un régime stationnaire pour $f^{(2)}$ est atteint en la durée de quelques collisions. Nous pouvons donc approximer

$$\frac{\partial f^{(2)}}{\partial t} \simeq 0$$

- La deuxième équation devient ainsi (par simplicité supposons l'absence de forces externes)

$$\frac{1}{2}\mathbf{K}_{1,2} \cdot \left(\nabla_{\mathbf{p}_1} - \nabla_{\mathbf{p}_2}\right) f^{(2)} = -\left[\frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} + \frac{\mathbf{p}_2}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_2}\right] f^{(2)}$$

- Remplaçons cette relation dans la première équation:

$$\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} f^{(1)} = \int_{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| < a} d^3 r_2 d^3 p_2 \left[\frac{\mathbf{p}_1}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_1} + \frac{\mathbf{p}_2}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}_2}\right] f^{(2)}$$

où nous avons indiqué que l'intégrale de collision est limité au rayon d'interaction

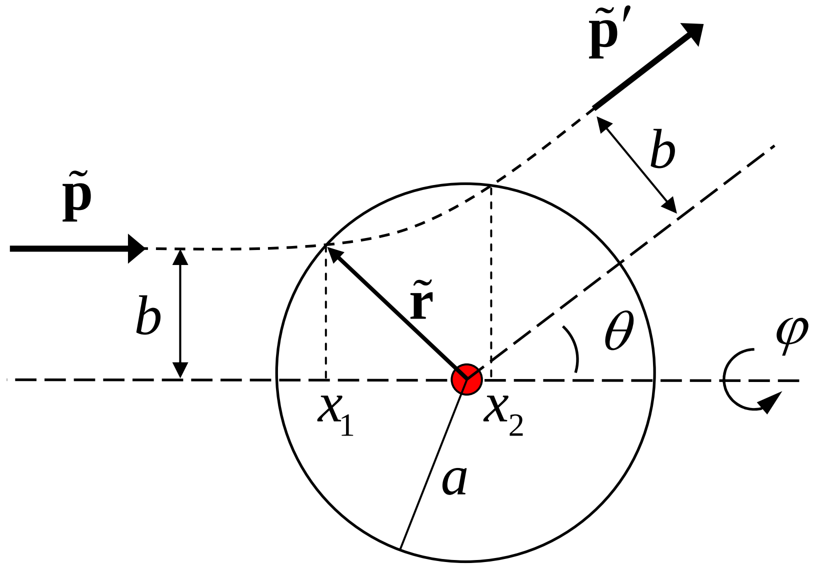
- Ecrivons l'intégrale de collision dans référentiel du centre de masse:

$$\mathbf{R} = \frac{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}{2} \qquad \tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$$

$$\mathbf{P} = \mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 \qquad \tilde{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}_2 - \mathbf{p}_1}{2}$$

$$\left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t}\right)_{coll} = \int d^3 p_2 \int_{\tilde{r}<a} d^3 \tilde{r} \, \frac{1}{m}\left[2\tilde{\mathbf{p}}\cdot\nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} + \frac{\mathbf{P}}{2}\cdot\nabla_{\mathbf{R}}\right] f^{(2)}$$

- Nous pouvons nous placer dans le référentiel du centre de masse et poser $\mathbf{P} = 0$



- Nous avons

$$\left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t}\right)_{coll} = -\frac{1}{m}\int d^3 p_2 \int_{\tilde{r}<a} d^3\tilde{r}\left(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2\right)\cdot\nabla_{\tilde{\mathbf{r}}} f^{(2)}$$

$$= \frac{1}{m}\int d^3 p_2 \int_{\tilde{r}<a} d^3\tilde{r}\left|\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2\right|\mathbf{x}\cdot\left(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\frac{\partial}{\partial z}\right) f^{(2)}$$

$$= \frac{1}{m}\int d^3 p_2 \int_{\tilde{r}<a} d^3\tilde{r}\left|\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2\right|\frac{\partial f^{(2)}}{\partial x}$$

- En passant aux coordonnées cylindriques on a finalement

$$\left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{1}{m}\int d^3 p_2 \left|\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2\right|\int d\varphi b db \int_{x_1}^{x_2} dx \frac{\partial f^{(2)}}{\partial x}$$

- Rappel (séance 2):

$$I\frac{d\sigma}{d\Omega}d\Omega = I b\, db\, d\varphi$$

- L'intégrale en x peut être formellement explicité

$$\left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t}\right)_{coll} = \frac{1}{m}\int d^3 p_2 \left|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2\right| \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(f^{(2)}\left(x_2\right) - f^{(2)}\left(x_1\right)\right)$$

- Nous introduisons l'hypothèse de chaos moléculaire:

$$f^{(2)}\left(x_1\right) = f^{(2)}\left(\mathbf{r},\mathbf{p}_1,\mathbf{r},\mathbf{p}_2,t\right) \simeq f^{(1)}\left(\mathbf{r},\mathbf{p}_1,t\right) f^{(1)}\left(\mathbf{r},\mathbf{p}_2,t\right)$$

$$f^{(2)}\left(x_2\right) = f^{(2)}\left(\mathbf{r},\mathbf{p}'_1,\mathbf{r},\mathbf{p}'_2,t\right) \simeq f^{(1)}\left(\mathbf{r},\mathbf{p}'_1,t\right) f^{(1)}\left(\mathbf{r},\mathbf{p}'_2,t\right)$$

Où nous avons aussi supposé le rayon de collision très petit en posant $\mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_2 = \mathbf{r}$

- Nous retrouvons ainsi le terme de collision de l'équation de Boltzmann

$$\left(\frac{\partial f^{(1)}}{\partial t}\right)_{coll} =$$

$$\frac{1}{m}\int d^3 p_2 \left|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2\right| \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}\left(f^{(1)}\left(\mathbf{p}'_1,t\right) f^{(1)}\left(\mathbf{p}'_2,t\right) - f^{(1)}\left(\mathbf{p}_1,t\right) f^{(1)}\left(\mathbf{p}_2,t\right)\right)$$