

DE L'IRRÉVERSIBILITÉ EN PHYSIQUE AUX TAUX OPTIMAUX DE CONVERGENCE

JEAN DOLBEAULT

RÉSUMÉ. *From irreversibility in physics to optimal convergence rates.* The explanation of irreversibility by L. Boltzmann at the end of the 19th century raised the attention of mathematicians to the notion of entropy, which was later reinvented several times in various areas of science ranging from probability theory to information theory. The issue of quantitative estimates is fundamental for applications: what is the rate of convergence of a solution to an equilibrium, if there is any? First results on this issue were obtained only quite recently, based on renormalized solutions of kinetic equations, mass transport and hypocoercive methods. Researchers of Dauphine and their collaborators played a central role in this area, at the interface of nonlinear analysis, measure theory and probability theory.

Ludwig Boltzmann, à la fin du XIX^{ème} siècle, a eu l'immense mérite de donner une explication à l'irréversibilité en physique. Sur des bases purement empiriques, cette notion d'irréversibilité avait été progressivement dégagée par des ingénieurs et des savants soucieux d'expliquer le fonctionnement des moteurs et en particulier des machines à vapeur. Des cycles de Carnot à la notion d'entropie proposée par Rudolf Clausius, la thermodynamique avait progressivement dégagé des lois sans pour autant leur donner un fondement conceptuel, et cela posait problème. A l'échelle microscopique, les lois de la physique sont réversibles : comment pouvait-on comprendre l'irréversibilité à l'échelle du laboratoire? Boltzmann avait alors démontré qu'un mécanisme réversible, comme une collision parfaitement élastique entre deux boules de billard, produisait dans le cas d'un système avec un très grand nombre de particules une dynamique irréversible lorsqu'on l'étudiait avec des méthodes statistiques. Ce résultat, dit Théorème H, a tout de suite attiré l'attention des mathématiciens : lors du congrès international des mathématiciens tenu à Paris en 1900, David Hilbert énonça une question, connue sous le nom de *Sixième problème de Hilbert*, qui porte précisément sur les extensions et les conséquences du travail de Boltzmann.

Très vite l'équation de Boltzmann a suscité énormément de travaux en physique mais, à quelques exceptions près, il a fallu attendre le troisième tiers du XX^{ème} siècle pour voir des progrès significatifs sur la théorie mathématique de cette équation et plus généralement des équations cinétiques. Entretemps la théorie du mouvement Brownien s'était largement développée, avec dès 1905 les travaux d'Albert Einstein, qui avaient conduit à la mesure du nombre d'Avogadro, une quantité qui fixe le nombre d'atomes dans une masse de matière donnée. Plus tard la notion d'entropie avait été redécouverte en théorie de l'information par Claude E. Shannon et l'on cite souvent à ce propos une phrase attribuée à John von Neumann mais dont de nombreuses versions circulent : "You should call it entropy for two reasons : first because that is what the formula is in statistical mechanics (...) and in the second place, no one understands entropy very well, so in any

discussion you will be in a position of advantage". Toujours en théorie de l'information suivirent très rapidement des estimations remarquables comme l'inégalité de Blachman-Stam, due à Nelson M. Blachman et Aart J. Stam, vingt ans avant les travaux de Leonard Gross sur l'inégalité de Sobolev logarithmique.

Dans les années 1980, l'étude de la ré-entrée d'engins spatiaux (avec en particulier le projet Hermès), et aussi l'étude des plasmas et des semi-conducteurs a amené toute une génération de mathématiciens appliqués à s'intéresser aux équations cinétiques avec des méthodes d'analyse multi-échelles, d'équations aux dérivées partielles non-linéaires et de calcul scientifique. Les résultats de Ronald J. DiPerna et Pierre-Louis Lions en 1989 sur les solutions renormalisées de l'équation de Boltzmann ont fourni un cadre compatible avec les contraintes de la physique et en particulier avec la notion d'entropie, compatible aussi avec les notions de solutions faibles en mécanique des fluides introduites dès 1934 par Jean Leray, et compatibles enfin avec le développement de codes numériques réalistes. Cette avancée spectaculaire a valu en 1994, parmi d'autres travaux, la médaille Fields à Pierre-Louis Lions, professeur à l'Université Paris-Dauphine depuis 1981. Décrire l'irréversibilité d'un point de vue conceptuel était certes très utile, mais en donner une estimation quantitative devenait dès lors un enjeu considérable, qui avait été mis en avant, entre autres, par Carlo Cercignani. Décider si la convergence vers un état d'équilibre était exponentielle ou non a suscité de nombreux travaux dans les années suivantes, auxquels des chercheurs de Dauphine ou formés à Dauphine ont joué un rôle important, en particulier dans le cadre de réseaux européens. Par exemple, Benoît Perthame, ancien élève de P.-L. Lions et directeur du LJLL, anciennement laboratoire d'analyse numérique commun à Paris VI et Paris VII, a dirigé le réseau Hyke qui a permis de former de très nombreux chercheurs à travers l'Europe. Cette communauté a aussi su se nourrir d'idées importées de divers champs de recherche, comme les équations hyperboliques, la théorie de l'information et celle des diffusions non-linéaires, ou encore de concepts apportés par la théorie des semi-groupes et des probabilités. Il convient de mentionner, par exemple, les apports de Giuseppe Toscani ou ceux de Dominique Bakry. Progressivement a émergé l'idée selon laquelle la mesure par une entropie du taux optimal de convergence vers un équilibre ou une solution stationnaire pouvait se traduire dans bien des cas par le calcul de la constante optimale dans une inégalité fonctionnelle.

Cette observation nécessite un détour supplémentaire. Dans le but d'étudier des problèmes de mécanique des fluides en météorologie, Jean-David Benamou et Yann Brenier introduisirent en 1999 une méthode de dualité pour décrire le transport de masse. Par ailleurs Richard Jordan, David Kinderlehrer et Felix Otto venaient d'interpréter l'équation de la chaleur comme le flot-gradient de l'entropie pour une certaine topologie ; dit autrement, les solutions de cette équation fondamentale suivent, dans un espace de fonctions déterminé par l'entropie et pour une topologie appropriée, une "ligne de plus grande pente" ; trouver des taux de convergence exponentiels pouvait dès lors s'expliquer par de simples propriétés de convexité. Ces travaux allaient donner le signal de départ d'un effort de recherche considérable, qui trouve aujourd'hui de nombreuses applications et permet de décrire aussi bien des réseaux d'infrastructure en économie urbaine que de

traiter des images ou encore de créer de nouveaux algorithmes pour l'intelligence artificielle. Très représentée au Ceremade, avec en particulier le rattachement d'une équipe Inria, la théorie du transport de masse est un exemple d'application des mathématiques qui couvre tout un champ de recherche, depuis des théories abstraites de flots-gradients dans des espaces de probabilités jusqu'à des applications concrètes en imagerie médicale ou en traduction automatique. Une partie des travaux de Cédric Villani, qui a soutenu sa thèse et son habilitation à diriger des recherches à Dauphine, se situent précisément à la base de toutes ces questions. Ce sont autant ses travaux, basés sur le transport de masse et ses applications en géométrie différentielle que ses recherches sur les méthodes d'entropie et l'estimation des taux de convergence dans l'équation de Boltzmann qui lui ont permis d'être récompensé à son tour par la médaille Fields, en 2010. Mais au-delà des récompenses prestigieuses, on doit souligner qu'à Dauphine c'est toute une génération de jeunes chercheurs qui a développé ces méthodes, à l'interface entre calcul des variations (transport de masse), théorie de la mesure, probabilités, étude des semi-groupes et analyse non-linéaire.

Pour revenir à la question des taux de convergence dans les équations cinétiques, il convient maintenant d'expliquer une de leurs propriétés. Du fait de l'équation de Newton et de ses variantes, la dynamique microscopique est déterminée par des équations du second ordre : les forces modifient les vitesses des particules et c'est le transport qui conditionne ensuite leur répartition spatiale, permettant éventuellement d'établir la convergence vers un état d'équilibre global. En particulier les collisions, ou les noyaux de diffusion pour les modèles aléatoires de collisions, n'agissent que sur les vitesses. Si ces collisions sont susceptibles d'amener rapidement le système à un équilibre local des vitesses, il faut en revanche du temps pour que l'équilibrage se fasse au niveau des positions. La théorie de l'hypocoercivité a été développée précisément pour mesurer à la fois le taux de convergence dans l'espace des phases, c'est-à-dire en position et en vitesse, et pour définir une notion de distance dans laquelle on mesure ce taux. Cédric Villani a là-encore contribué largement au développement et à la popularisation de l'hypocoercivité, mais il convient de remonter aux travaux de Lars Hörmander sur l'hypoellipticité, et même d'Andreï N. Kolmogorov, pour trouver les premiers résultats dans cette direction. Les théories hypoelliptique et hypocoercive sont maintenant bien distinctes, l'hypocoercivité permettant de traiter de noyaux de collisions sans effets régularisants. Trouver les estimations optimales des taux de convergence (c'est-à-dire, en pratique, le pire scénario possible pour la convergence), déterminer les espaces fonctionnels les plus larges possibles par des méthodes d'élargissement spectral, caractériser les meilleures notions de distance, tout cela constitue aujourd'hui un domaine de recherche très actif qui mobilise plusieurs chercheurs du Ceremade et des collaborateurs très actifs, comme Christian Schmeiser ou Clément Mouhot, professeurs à Vienne et à Cambridge respectivement. En 100 ans, les objectifs ont bien changé : il ne s'agit plus de définir l'irréversibilité ou d'en tirer des conséquences pour l'existence de solutions, mais de mesurer des taux de convergence avec des notions de distance appropriées et d'en donner les meilleures estimations possibles.