

# WEEK-END MATHÉMATIQUE 2016

---

L'équation de Boltzmann

---

Intervenante

LAURE SAINT-RAYMOND

Rédacteur

IDRISS MAZARI



*À la mémoire de Pierre Ueber,*

## Un week-end au château du Goutelas

Haute tradition du département de mathématiques de l'ENS de Lyon et de l'UMPA, le week-end mathématique fêtait cette année son quatorzième anniversaire au château du Goutelas, sous la surveillance bienveillante de Jean Papon et en compagnie de Laure Saint-Raymond. Après une session 2015 consacrée aux plongements isométriques de Nash sous la houlette de C. Villani, les étudiants se sont cette année intéressés à l'équation de Boltzmann, et nous vous proposons de prendre part à leur aventure grâce à ce rapport. Ce week-end n'aurait pas pu voir le jour sans les organisateurs (A. Bordas, V. Calvez, D. Gaboriau, E. Ghys et G. Miermont) ni l'investissement de L. Saint-Raymond. Nous profitons de l'occasion pour tous les remercier.

Ce document tente de rendre compte, le plus fidèlement possible, du contenu des interventions de L. Saint-Raymond au cours de ce week-end. Nous la remercions pour sa relecture du document et pour toutes ses corrections. Il va de soi qu'aucune des erreurs/fautes/bourdes qui peuvent subsister dans ce rapport ne saurait lui être imputée.

En vous souhaitant une agréable lecture,

I. Mazari

## Table des matières

Un week-end au château du Goutelas . . . . .	iii
I Exposé introductif . . . . .	1
I Introduction à l'introduction . . . . .	1
II L'équation de Boltzmann . . . . .	1
III Propriétés physiques de l'équation de Boltzmann . . . . .	3
II Le théorème de Lanford . . . . .	7
I Les controverses autour de l'équation de Boltzmann . . . . .	7
II Dynamique des sphères dures . . . . .	7
III Le scaling de Boltzmann-Grad . . . . .	8
IV Un premier énoncé du théorème . . . . .	9
III Schéma de la preuve du théorème de Lanford . . . . .	10
I L'équation de Liouville . . . . .	10
II La hiérarchie BBGKY . . . . .	12
III Interprétation géométrique de la formule de Duhamel . . . . .	13
IV L'apparition de l'irréversibilité . . . . .	14

## I. Exposé introductif

Dans toute la suite, nous noterons, pour une fonction  $h = h(t, x, v)$ ,  $\nabla_x h$  le gradient de  $h$  par rapport à la seule variable  $x$ .

### I-A. Introduction à l'introduction

Commençons, à la demande de Laure Saint-Raymond, par une introduction soft ; on distingue essentiellement deux types de mathématiques : celles dont les objets sont simples et les questions compliquées, et celles dont les objets sont compliqués et les questions simples. C'est cette deuxième catégorie qui nous intéresse ici et, plus spécifiquement, les équations aux dérivées partielles. Le dada de Laure Saint-Raymond, c'est l'**équation de Boltzmann**, une équation de la physique mathématique. Certes, mais pourquoi cette équation est-elle importante pour la physique ? Parce qu'elle a été (et reste) très utile pour l'étude de nombreux phénomènes : l'entrée de véhicule dans la stratosphère, certains écoulements d'air... de sorte qu'il serait agréable qu'elle ait le bon goût d'être « correcte », en un certain sens. D'autant plus que les études qualitatives et les simulations numériques réalisées à partir de cette équation fournissent des résultats corrects. En d'autres termes, pourquoi est-elle importante pour la physique ? En fait, personne ne sait donner de réponse exhaustive à cette question, et nous essaierons de donner une intuition des objets considérés.

Pour une personne qui n'aura jamais joué de musique, une partition mise devant ses yeux peut ne rien évoquer en lui sinon un vague désintérêt ou, parfois, une légère angoisse devant cette suite de symboles cabalistiques. Certains musiciens aguerris, en revanche, ont simplement besoin de voir une partition pour commencer à entendre de la musique. Les équations aux dérivées partielles fonctionnent un peu sur le même modèle : c'est de l'habitude et de la pratique que naît l'intuition. De manière plus générale, les mathématiques sont de ces objets avec lesquels l'on se familiarise à la suite du temps passé en leur compagnie.

### I-B. L'équation de Boltzmann

Boltzmann était un physicien, mathématicien et philosophe viennois de la seconde moitié du dix-neuvième siècle. Il est connu pour ses nombreuses contributions à la physique, notamment pour sa constante  $k_B$  (sur la valeur numérique de laquelle nous garderons un silence pudique) et pour son équation. Cette équation est également importante en mathématique, et est un véritable saut conceptuel : c'est la première fois que l'on écrit une équation d'évolution pour une densité de probabilité (que nous appellerons également fonction de distribution). Dans le cas le plus simple, cette densité  $f$  prendra la forme

$$f = f(t, x, v),$$

où  $t$  sera le temps,  $x$  la variable d'espace, appelée à évoluer dans un domaine  $\Omega \subset \mathbb{R}^d$  (rapidement,  $\Omega$  sera égal à  $\mathbb{R}^d$  ou au tore  $\mathbb{T}^d$ ) et  $v \in \mathbb{R}^d$  la vitesse. On voit déjà pourquoi on s'attend à obtenir une équation aux dérivées partielles. Cette fonction  $f$  correspond à la distribution en position et en vitesse des particules au sein du gaz. Évidemment, à un instant  $t$ , cet objet n'est pas repérable empiriquement et semble moins précis qu'une description du gaz par un système gigantesque d'équations constitué de l'ensemble des équations correspondant à chaque particule. Cependant, même si  $f$  est moins précise que le système gigantesque, elle l'est plus que toute quantité physiquement observable, puisqu'elle permet de retrouver toutes les quantités physiquement mesurables (température, pression...). La question est donc la suivante : connaissant cette densité  $f$  à un instant  $t_0$ , peut-on connaître  $f(t, \cdot, \cdot)$  pour tout  $t \geq t_0$  ?

Dans le modèle le plus simple de théorie cinétique, deux phénomènes interviennent essentiellement :

- **Transport libre** : ce phénomène correspond simplement au déplacement d'une particule qui n'est soumise à aucune force extérieure ; suivant le principe de Galilée, sa vitesse reste constante. En d'autres termes, si  $\Omega = \mathbb{R}^d$ , si une particule est initialement dans l'état  $(x_0, v_0)$ , elle sera à un instant  $t$  dans l'état  $(x_0 + tv_0, v_0)$ . Si seul ce phénomène de transport était en jeu, l'équation d'évolution serait beaucoup plus simple, puisque, avec une densité initiale  $f_0$ , la densité à l'instant  $t$  serait tout simplement donnée par

$$f(t, x(t), v) = f_0(x, v),$$

avec

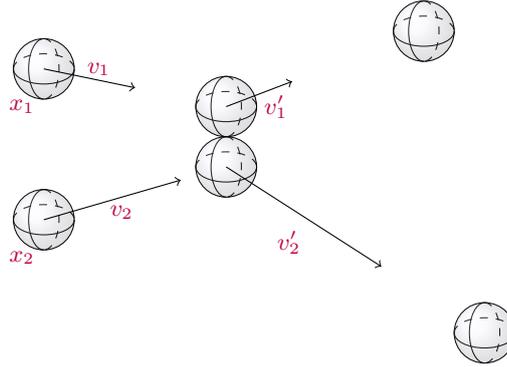
$$x(t) = x + tv.$$

L'équation d'évolution correspondante, obtenue en dérivant la relation précédente, est alors

$$\frac{\partial f}{\partial t}(t, x, v) + \langle v, \nabla_x f(t, x, v) \rangle = 0, \quad (\text{I.1})$$

et on l'appelle **équation du transport libre**. Cependant, un gaz n'est pas constitué de molécules qui s'ignorent mutuellement, ce qui explique que l'on rajoute un phénomène de collisions.

- **Collisions** : là, c'est un peu plus compliqué à mettre en équations. le problème, c'est qu'on ne sait pas comment deux particules qui entrent en collision interagissent, ce qui justifie une hypothèse de type « sphère dure ». Faisons donc comme si toutes les particules étaient de petites boules rigides, ce qui est exagéré, mais pas trop faux. Si on les lance, en notant  $x_i$  le centre de la  $i$ -ème particule et  $v_i$  sa vitesse, si on part avec deux boules, on peut se retrouver dans la situation suivante :



et il nous faut donc spécifier les lois qui permettent d'obtenir les nouvelles vitesses  $v'_1$  et  $v'_2$  en sortie de collision. On peut obtenir ces lois grâce aux différentes lois de conservation de la physique classique. Pour alléger les notations, toutes les particules seront prises de masse unitaire 1. On a **conservation de la quantité de mouvement** :

$$v_1 + v_2 = v'_1 + v'_2, \quad (\text{I.2})$$

mais également **conservation de l'énergie cinétique** :

$$|v_1|^2 + |v_2|^2 = |v'_1|^2 + |v'_2|^2. \quad (\text{I.3})$$

C'est alors un exercice de géométrie élémentaire que de montrer que  $v'_1$  et  $v'_2$  sont uniquement déterminées par ces équations, et prennent la forme suivante, où  $\omega = \frac{x_1 - x_2}{|x_1 - x_2|}$ , avec  $x_i$  les centres des particules au moment du choc :

$$\begin{cases} v'_1 &= v_1 - \langle v_1 - v_2, \omega \rangle \omega \\ v'_2 &= v_2 + \langle v_1 - v_2, \omega \rangle \omega \end{cases} \quad (\text{I.4})$$

Si l'on avait un potentiel d'interaction plus compliqué, il n'est pas dit que l'expression précise des nouvelles vitesses soit aussi simple et pourtant, à une certaine distance, on observe le même phénomène de dispersion, comme dans l'expérience de Rutherford. Toutes ces collisions devraient rajouter des termes dans l'équation, puisqu'elles mènent à la création et à la destruction de particules de vitesse  $v$ . Soit, pour une vitesse  $v$  fixée,  $\mathcal{C}^+(t, v)$  le nombre de particules de vitesse  $v$  créés par ces collisions à l'instant  $t$  et  $\mathcal{C}^-(t, v)$  le nombre de particules de vitesse  $v$  détruites à l'instant  $t$ ; l'équation d'évolution se réécrit

$$\frac{\partial f}{\partial t}(t, x, v) + \langle v, \nabla_x f(t, x, v) \rangle = \mathcal{C}^+(t, v) - \mathcal{C}^-(t, v).$$

Essayons de calculer  $\mathcal{C}^+(t, v)$ . Pour créer une particule de vitesse  $v$ , il nous faut deux particules, de vitesse  $v_1$  et  $v_2$ , qui rentrent en collision et qui créent une particule de vitesse  $v$ . Donc il nous faut  $v'_1 = v$  ou  $v'_2 = v$ . On doit paramétrer par l'angle de la collision, c'est-à-dire par un vecteur unitaire  $\omega$ , comme précédemment. Enfin, on doit quantifier la probabilité que les deux particules rentrent en collision. Pour cela, on introduit un **taux de saut** (on trouve aussi "noyau de collision" dans la littérature), qui dépend de l'interaction des particules ; dans le cas de sphère dures, on prend le taux de saut qui correspond à la section efficace des collisions, à savoir  $|\langle v - v_1, \omega \rangle|$ .

REMARQUE. Nous obtiendrons de manière « naturelle » ce taux de saut quand nous aborderons le passage à la limite dans le modèle d'un système de  $N$  sphères dures en interaction.

En mettant toutes ces contributions ensemble, on obtient donc

$$\mathcal{C}^+(t, x, v) = \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \int_{\mathbb{R}^d} |\langle v - v_*, \omega \rangle| \left( f(t, x, v - \langle v - v_*, \omega \rangle \omega) f(t, x, v_* + \langle v - v_*, \omega \rangle \omega) \right) dv_* d\omega.$$

Pour alléger les notations, on note  $v'_* := v_* + \langle v - v_*, \omega \rangle \omega$  et  $v' := v - \langle v - v_*, \omega \rangle \omega$ . De même, on supprime dans l'intégrale précédente la dépendance en  $t$  et  $x$ . On obtient finalement

$$\mathcal{C}^+(v) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} |\langle v - v_*, \omega \rangle| f(v') f(v'_*) d\omega dv_*,$$

et, de même,

$$\mathcal{C}^-(v) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} |\langle v - v_*, \omega \rangle| f(v) f(v_*) d\omega dv_*.$$

Toutes ces considérations étant faites, on obtient donc l'**équation de Boltzmann** :

$$\left\{ \frac{\partial f}{\partial t} + \langle v, \nabla_x f \rangle = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} |\langle v - v_*, \omega \rangle| \left( f(v') f(v'_*) - f(v) f(v_*) \right) d\omega dv_* \right\} \quad (\text{I.5})$$

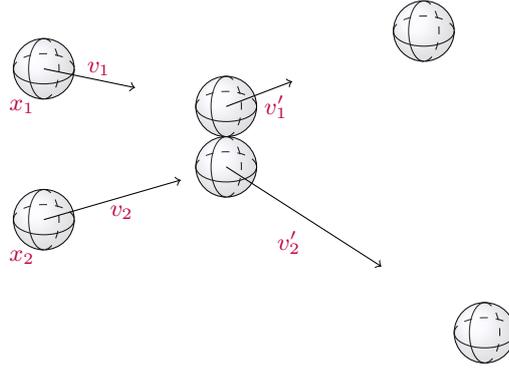
Remarquons donc qu'à partir d'un raisonnement fondé sur des lois physiques déterministes, on arrive à une description statistique du gaz. Si les raisonnements semblent avoir été faits avec un minimum de rigueur, il y a une grosse arnaque : pourquoi la probabilité d'avoir une particule de vitesse  $v_1$  et une de vitesse  $v_2$  est-elle égale à  $f(v_1)f(v_2)$  ? En d'autres termes, pour parler en termes de variables aléatoires (puisque  $f$  est à renormalisation près une densité de probabilité), pourquoi les vitesses de deux particules sont-elles des variables aléatoires indépendantes ? C'est l'hypothèse fondamentale de Boltzmann, le **chaos moléculaire**. Dans le texte de Boltzmann, même un niveau particulièrement faible en allemand permet de se rendre compte que le physicien ne propose pas de fondement rigoureux et indique qu'il ne s'agit que d'une hypothèse. De même, comment justifier le taux de saut ? Ce taux de saut est d'une certaine manière la trace mésoscopique d'une interaction microscopique. Enfin, peut-on prouver que cette équation peut s'obtenir, rigoureusement, à partir de la dynamique déterministe des sphères dures ?

### I-C. Propriétés physiques de l'équation de Boltzmann

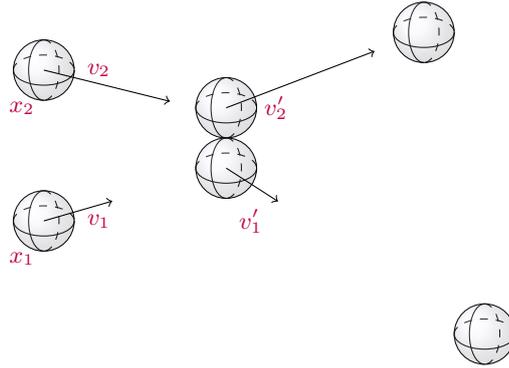
Avant d'essayer de comprendre à quoi l'on peut légitimement s'attendre en tant que mathématicien, chaussons des lunettes de physicien et dérivons, de manière formelle, certaines propriétés de l'équation de Boltzmann. N'oublions pas que l'existence et l'unicité des solutions d'une équation sont dans un premier temps le cadet des soucis des physiciens.

Plus précisément (et c'est une bonne nouvelle pour ceux de l'assemblée qui n'ont jamais compris leurs cours de thermodynamique), nous allons montrer comment retrouver le second principe de la thermodynamique. Ce second principe, souvent appelé « croissance de l'entropie », ou « croissance du désordre », repose sur deux propriétés microscopiques du modèle :

- Échangeabilité : c'est une forme de symétrie. On suppose que toutes les particules sont similaires, c'est-à-dire que l'équation est invariante sous les permutations  $\left( (x, v), (x_1, v_1) \right) \rightarrow \left( (x_1, v_1), (x, v) \right)$ . Évidemment, cela ne serait plus vérifié si l'on travaillait avec des sphères de tailles et de formes différentes.
- Réversibilité : Essentiellement, cela signifie que la situation suivante



est équivalente à celle-ci :



C'est simplement une autre manière d'exprimer le fait qu'en notant  $v' = v + \langle v_1 - v, \omega \rangle \omega$ , l'application  $(v, v_1) \mapsto (v', v'_1)$  est une application involutive, et que la section efficace de collision est invariante par cette transformation. Ceci se vérifie par un calcul direct.

**faire les schémas de ces différentes situations.**

Revenons à l'opérateur de collision  $\mathcal{C}(f)$ . Vu sa définition on a, pour toute fonction  $\varphi$  un tant soit peu régulière (de toute façon, pour les moments, toutes les fonctions sont intégrables et aussi lisses que nécessaire)

$$\int_{\mathbb{R}^d} \varphi(v) \mathcal{C}(f)(v) dv = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} |\langle v - v_1, \omega \rangle| \left( f(v') f(v'_*) - f(v) f(v_*) \right) \varphi(v) d\omega dv_* dv.$$

La propriété d'échangeabilité se traduit par l'égalité

$$\int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{S}^{d-1}} |\langle v - v_1, \omega \rangle| \left( f(v') f(v'_*) - f(v) f(v_*) \right) \varphi(v) d\omega dv_* dv = \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{S}^{d-1}} |\langle v - v_1, \omega \rangle| \left( f(v'_*) f(v') - f(v_*) f(v) \right) \varphi(v_*) d\omega dv_* dv,$$

de sorte que

$$\int_{\mathbb{R}^d} \varphi(v) \mathcal{C}(f)(v) dv = \frac{1}{2} \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} |\langle v - v_1, \omega \rangle| \left( f(v') f(v'_*) - f(v) f(v_*) \right) \left( \varphi(v) + \varphi(v_*) \right) d\omega dv_* dv \right\}.$$

De même remplaçant  $(v, v_*)$  par  $(v', v'_*)$  dans l'intégrale et en utilisant le fait que  $|\langle v - v_*, \omega \rangle| = |\langle v' - v'_*, \omega \rangle|$ , la propriété de réversibilité garantit que

$$\int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{S}^{d-1}} |\langle v - v_*, \omega \rangle| \left( f(v') f(v'_*) - f(v) f(v_*) \right) \varphi(v) d\omega dv_* dv = - \int_{\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \times \mathbb{S}^{d-1}} |\langle v - v_*, \omega \rangle| \left( f(v'_*) f(v') - f(v_*) f(v) \right) \varphi(v'_*) d\omega dv_* dv,$$

de sorte qu'on obtient pour toute fonction  $\varphi$  l'identité

$$\int_{\mathbb{R}^d} \varphi(v) \mathcal{C}(f)(v) dv = \frac{1}{4} \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} |\langle v - v_*, \omega \rangle| \left( f(v') f(v'_*) - f(v) f(v_*) \right) \left( \varphi(v) + \varphi(v_*) - \varphi(v') - \varphi(v'_*) \right) d\omega dv_* dv \right\}. \quad (\text{I.6})$$

Évaluons l'identité précédente pour différentes fonctions  $\varphi$ .

En prenant  $\varphi \equiv 1$ , on obtient

$$\int_{\mathbb{R}^d} \mathcal{C}(f)(v) dv = 0, \quad (\text{I.7})$$

ce qui correspond à la conservation du nombre de particules : il y a autant de particules créées (au sens du passage dans un état nouveau, pas d'une apparition alchimique) que détruites.

En prenant  $\varphi(v) = v$ , on obtient

$$\int_{\mathbb{R}^d} v \mathcal{C}(f)(v) dv = 0, \quad (\text{I.8})$$

où l'égalité est à prendre coordonnée par coordonnée. Cette identité correspond à la conservation de la quantité de mouvement au sein du gaz.

En prenant  $\varphi(v) = |v|^2$ , on obtient

$$\int_{\mathbb{R}^d} |v|^2 \mathcal{C}(f)(v) dv = 0,$$

puisque la conservation de l'énergie cinétique correspond dans ce cas particulier à  $\varphi(v) + \varphi(v_*) = \varphi(v') + \varphi(v'_*)$ .

Donc jusqu'ici, l'équation semble parfaitement raisonnable. Notons que ces identités permettent également de faire un lien avec l'hydrodynamique, ces trois lois de conservation (masse, quantité de mouvement et énergie) en formant les fondements.

Cependant les choses étonnantes commencent ici. Prenons  $\varphi = \ln(f)$ . On sait que le logarithme est croissant, donc pour tout  $x, y$  on a  $(x - y)(\ln(x) - \ln(y)) \geq 0$ . En utilisant l'identité intégrale précédente, on récupère

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} \mathcal{C}(f)(v) \ln(f)(v) dv &= \frac{1}{4} \left\{ \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} |\langle v - v_*, \omega \rangle| \left( f(v') f(v'_*) - f(v) f(v_*) \right) \left( \ln \frac{f(v) f(v_*)}{f(v') f(v'_*)} \right) d\omega dv_* dv \right\} \\ &\leq 0. \end{aligned}$$

Par ailleurs, si  $f$  est solution de l'équation de Boltzmann

$$\frac{\partial(f \ln(f))}{\partial t} + \langle v, \nabla_x (f \ln(f)) \rangle = (1 + \ln(f)) \mathcal{C}(f).$$

On intègre cette relation en vitesse, puis en espace, en remarquant que, par intégration par parties en la variable d'espace, l'intégrale du second terme du membre de gauche vaut 0, et l'on récupère après une cavalière justification de l'interversion dérivée/intégrale

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} f \ln(f) = \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \mathcal{C}(f)(v) dv dx + \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} \mathcal{C}(f)(v) \ln(f(x, v)) dv dx \quad (\text{I.9})$$

$$\leq 0. \quad (\text{I.10})$$

Finalement :

$$\frac{d}{dt} \left( \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} f(t, x, v) \ln(f(t, x, v)) dx dv \right) \leq 0. \quad (\text{I.11})$$

Donc **une certaine quantité est dissipée dans l'évolution de la densité**. Dit avec un langage de systèmes dynamiques, la dynamique de l'équation de Boltzmann admet une fonction de Lyapunov,

ce qui est fondamentalement incompatible avec un système réversible : si le système était réversible, il faudrait que l'entropie puisse décroître, pour passer de l'état initial à un état différent, puis croître pour effectuer le changement d'état inverse. Ce genre de problèmes, qui signifient bien qu'on nous a filoutés quelque part, peut s'avérer assez dangereux, surtout dans la mesure où cette équation sert aujourd'hui à envoyer des sondes dans l'espace... Où est passée cette quantité manquante ? Donnons-lui un nom : on note

$$H(f) := \int_{\mathbb{R}^d} \int_{\mathbb{R}^d} f(t, x, v) \ln \left( f(t, x, v) \right) dx dv \quad (\text{I.12})$$

l'**entropie de la densité**. Évidemment, les physiciens ont une convention tout à fait différente, et appellent  $-H(f)$  l'entropie, de sorte que l'entropie est pour eux une fonction croissante.

On peut vérifier que les gaussiennes de la forme  $f(t, x, v) = \kappa e^{-\alpha|v|^2}$  sont, d'une part des équilibres de l'équation de Boltzmann, et d'autre part sont bien extrémales pour l'entropie.

Que fait le mathématicien devant ce phénomène ? Toujours avec une longueur de retard sur les physiciens (eux ont les propriétés, tandis que les mathématiciens en sont encore aux questions), il essaie de répondre aux questions suivantes :

- Est-ce qu'il y a une solution ? Nous n'évoquerons quasiment pas cette question ; les réponses, partielles, que Pierre-Louis Lions et Ronald DiPerna ont apportées, ont valu au premier sa médaille Fields de 1994. Les techniques en jeu sont très compliquées (techniques de renormalisation notamment), et on ne parle même pas de l'unicité.
- Quel est le comportement en temps grand des solutions ? En d'autres termes, peut-on prouver ou infirmer l'existence de convergence ou de relaxations vers un équilibre ? Ces questions aussi sont extrêmement dures, et Cédric Villani a obtenu des résultats dans ce domaine, mais fortement conditionnels (c'est-à-dire que la solution de l'équation est supposée par exemple avoir  $n$  moments, vérifier certaines majorations et minorations...).
- Que se passe-t-il si le phénomène de collision est bien plus rapide que le phénomène de transport ? Ces questions relèvent de l'hydrodynamique, et l'on peut prouver, rigoureusement, que l'équation de Navier-Stokes s'obtient comme limite de l'équation de Boltzmann.
- Cette équation est-elle physiquement pertinente ? Peut-on par exemple la dériver à partir de modèles microscopiques ? C'est cette question qui va nous intéresser pendant le reste du week-end.

## II. Le théorème de Lanford

### II-A. Les controverses autour de l'équation de Boltzmann

Reprenons un peu l'histoire de ce paradoxe. L'équation, écrite aux alentours de 1872, fait dès sa parution grand bruit, et de nombreux physiciens s'y opposent violemment. Citons à titre d'exemple Mach, qui ne voit pas l'intérêt d'une conception particulière de la matière et entend tout interpréter en termes d'énergie, ou encore Loschmidt, qui met le doigt sur le problème de l'irréversibilité dans l'équation de Boltzmann, Zermelo, qui abonde dans le sens de Loschmidt. Dans le même courant d'idée, on peut également évoquer Poincaré et son principe de récurrence : énoncé de manière un peu grossière, il dit que, pour un système dynamique hamiltonien générique (réversible), le système repassera à une distance infiniment proche de sa configuration initiale, ce qui est manifestement incompatible avec l'existence d'un attracteur. Poincaré n'a pas pris part dans la querelle, mais cette contradiction avait été soulignée par Zermelo. Boltzmann en a pris un coup, ce qui ne l'a sans doute pas aidé quand il a pris la décision de se suicider, en 1906. Un assez mauvais timing, donc, puisque sa théorie reviendra en force avec les travaux de Planck (qui ne croyait pas à cette théorie moléculaire mais l'avait employée à la fin du dix-neuvième siècle) et d'Einstein (qui la poussa jusqu'à obtenir une estimation du nombre d'Avogadro ; sa contribution lancera par ailleurs Jean Perrin sur la route du Nobel) quasiment au même moment.

Pour avoir un début d'éclaircissement de ce paradoxe, il faudra attendre les travaux de Grad, entre 1958 et 1962, qui a compris quel type d'approximation il fallait faire. Le premier théorème mathématique est dû à Lanford, en 1975, mais sa démonstration comporte un bug, résolu (on l'espère) en 2015. Et c'est ce théorème (privé de ses détails techniques), que nous allons essayer d'expliquer. La preuve est élémentaire, ce qui ne signifie absolument pas qu'elle soit simple.

### II-B. Dynamique des sphères dures

Le système dont on admet (affirmation sujette à caution) qu'il représente le gaz est de la forme suivante : on a  $N$  sphères, de diamètre  $\varepsilon$ , qui vivent dans le tore  $d$ -dimensionnel  $\mathbb{T}^d$  (ce qui, mathématiquement, évite d'avoir à se compliquer la vie avec des conditions de bord. Plus physiquement, ce tore peut représenter une boîte avec conditions de réflexion. C'est de plus un domaine qui présente l'immense avantage d'être borné). Deux sphères qui se rentrent dedans n'échangent pas de moment angulaire, de sorte que l'on peut négliger leurs rotations propres. On repère chacune de nos particules par une position et une vitesse, c'est à-dire que l'on considère la collection  $\{(X_i, V_i)\}_{i=1, \dots, N}$ . Il s'agit des degrés de liberté du système. En l'absence de collisions (pendant la phase de transport libre donc), chacune des molécules suit les lois de la mécanique classique, c'est-à-dire que

$$\begin{cases} \frac{dX_i}{dt} = V_i, \\ \frac{dV_i}{dt} = 0 \text{ si } \forall j \neq i, |X_i - X_j| > \varepsilon. \end{cases} \quad (\text{II.1})$$

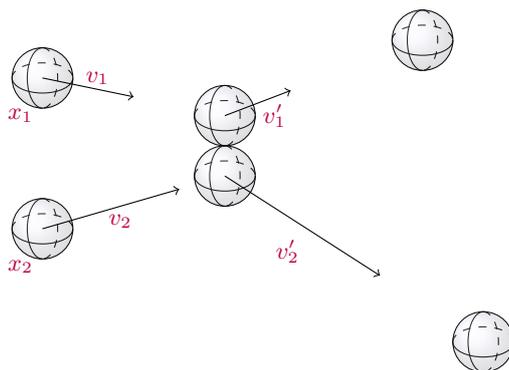
On rappelle les lois de réflexions imposées : si  $|X_i - X_j| = \varepsilon$ , on note  $n_{i,j} := \frac{X_i - X_j}{\varepsilon}$  et on introduit les conditions de saut suivantes : après le choc, le couple  $((X_i, V_i), (X_j, V_j))$  devient  $((X_i, V'_i), (X_j, V'_j))$ , avec

$$\begin{cases} V'_i = V_i - \langle V_i - V_j, n_{i,j} \rangle n_{i,j}, \\ V'_j = V_j + \langle V_i - V_j, n_{i,j} \rangle n_{i,j}. \end{cases}$$

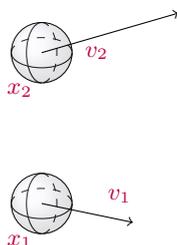
D'une certaine manière, chaque collision réinitialise le système. Il semble difficile de simplifier encore le modèle, mais est-il déjà clair que l'on a existence en tout temps d'une solution de ce système ? Les discontinuités à chaque collision font que ce système ne rentre pas dans le cadre du théorème de Cauchy-Lipschitz et, mathématiquement, certaines trajectoires ne sont pas définies en tout temps. Les cas pathologiques qui peuvent se présenter peuvent être de deux natures : une collision multiple (c'est-à-dire à plus de trois particules) et la présence d'un point d'accumulation en temps pour les collisions. Pour les collisions multiples, le problème est que l'on ne sait pas définir des conditions de saut qui soient stables. Ces deux problèmes sont essentiellement les mêmes.

REMARQUE. Et ça, c'est si on travaille avec des sphères. La question deviendrait infiniment plus compliquée en faisant varier la géométrie : par exemple, avec juste deux objets, une ellipse dans le plan et un disque que l'on fait se taper, après combien de collisions se séparent-ils, si tant est qu'ils se séparent ? Alors que deux boules seules dans l'espace qui se cognent ne se revoient jamais plus. De même, en changeant la géométrie du problème, de nouveaux problèmes apparaîtraient : dans le cas du tore, par exemple, il faudrait introduire un contrôle des collisions périodiques.

On va s'intéresser au comportement statistique de ce gaz, c'est-à-dire à la limite  $N \rightarrow 0$  et  $\varepsilon \rightarrow 0$  (puisque l'on n'a pas envie de changer de boîte, il faut bien que les particules deviennent de plus en plus petites). Mais encore faut-il comprendre les vitesses de convergence... Un autre problème qui risque d'apparaître assez rapidement est celui de la stabilité : à la manière d'un billard, un léger décalage sur la position initiale de la boule peut mener à des trajectoires très différentes en un temps court. De même, en considérant les deux particules suivantes, à distance  $\varepsilon + \delta$  (donc très peu de temps avant une collision) :



on voit qu'en déplaçant la première d'une distance  $2\varepsilon$  vers le bas, on arrive dans la configuration suivante :



de sorte que les deux particules ne rentrent même plus en collision. Il faut donc envisager des déplacements d'ordre au plus  $\varepsilon^2$  pour le cas d'une seule collision. En notant  $M_N$  le nombre de collisions, il faudra donc une précision de l'ordre  $\varepsilon^{2M_N}$ .

### II-C. Le scaling de Boltzmann-Grad

Revenons sur cette histoire de scaling : si  $N \rightarrow +\infty$ , quelle doit être la vitesse de décroissance du rayon  $\varepsilon$  des sphères dures ? Soit donc  $N \gg 1$  (attention à bien noter qu'un physicien regardera comme hérétique la tentative de faire tendre  $N$  vers  $+\infty$  ; il n'y a jamais qu'un nombre fixe de particules). Déjà, le tore  $\mathbb{T}^d$  est de volume 1. On veut avoir un gaz parfait, pas un solide, donc le volume total occupé par les particules doit être très petit :

$$N\varepsilon^d \ll 1.$$

Peut-on obtenir d'autres contraintes ? En fait oui, grâce à un calcul de Maxwell qui porte sur le **libre parcours moyen** : il s'agit de la distance moyenne parcourue par une particule avant d'entrer de nouveau en collision avec une autre particule. Maxwell propose de voir l'ensemble du gaz, moins une particule, comme un réseau fixe dans  $\mathbb{R}^d$  et de considérer une particule qui se déplace dans ce réseau, afin d'en calculer le libre parcours moyen. À défaut d'une grande précision, cela devrait du moins fournir un ordre de grandeur satisfaisant. L'hypothèse sous-jacente de notre modèle (qui n'est plus

vérifiée quand on ne prend plus un gaz peu dense), c'est que le transport libre compte autant dans la dynamique que les collisions. En d'autres termes, le libre parcours moyen doit être de l'ordre de 1. Maintenant, si, au lieu de s'asseoir sur la particule en mouvement, on décide que la particule est fixe, c'est le graphe entier qui symbolise le gaz que l'on voit se déplacer vers nous, à vitesse  $-V$  donc. Ce qui nous arrive en pleine tête est donc un cylindre, de section  $\varepsilon^{d-1}|V|t$  (on parle aussi de **section efficace**), de sorte que le volume total est d'ordre  $N\varepsilon^{d-1}|V|t$ . On doit donc demander, pour avoir un libre parcours moyen de l'ordre de l'unité,

$$N\varepsilon^{d-1} \sim 1.$$

Cette quantité est en fait l'inverse du libre parcours moyen. Ce scaling particulier, cette échelle, est appelé **scaling de Boltzmann-Grad**.

REMARQUE. En fait, en posant

$$\alpha := N\varepsilon^{d-1},$$

l'inverse du libre parcours moyen, on s'attend à avoir, pour  $\alpha \gg 1$ , un régime fluide. Pour  $\alpha \ll 1$ , on s'attend à avoir un gaz parfait.

### II-D. Un premier énoncé du théorème

Tout cela est bel et bon, mais quel théorème souhaitons-nous démontrer, déjà ? Qu'est-ce qui a une chance de converger ? Notons  $f_N$  la fonction de répartition pour le système de  $N$  particules, définie donc sur  $\mathbb{R}^+ \times (\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d)^N$ .  $f_N$  est bien plus complète que la solution  $f$  de l'équation de Boltzmann, puisque  $f$  ne s'intéresse qu'à l'état d'une particule « typique ». La convergence des marginales  $f_N$  vers  $f$  aura lieu en moyenne, en moyennes en fait. Le point délicat, c'est de réduire l'immense espace des phases  $(\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d)^N$  à un plus petit espace des phases,  $\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d$ . De plus, la convergence, à l'instar d'un théorème type loi des grands nombres, aura lieu en un sens très fort, ce qui empêche d'atteindre des temps grands de convergence. C'est ce qui, peut-être, rend ce théorème peu satisfaisant du point de vue de la physique.

Le théorème s'énonce, de manière assez lâche, comme suit :

THÉORÈME II.1. *Soit un système de  $N$  boules identiques, de diamètre  $\varepsilon$ , où ces deux constantes vérifient le scaling de Boltzmann-Grad. On suppose que les états ces boules sont à l'instant initial indépendamment distribuées suivant une distribution  $f_0$  et indépendantes. Pour des raisons techniques (afin de tuer les grandes vitesses en fait), on fait l'hypothèse suivante sur  $f_0$  : il existe des constantes  $\beta_0, \mu_0$  strictement positives telles que, pour tout  $(x, v) \in \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$ ,*

$$|f_0(x, v)| \leq e^{-\mu_0} e^{-\beta_0 \frac{|v|^2}{2}}.$$

*Alors, dans la limite  $N \rightarrow +\infty$ ,  $\varepsilon \rightarrow 0$ ,  $N\varepsilon^{d-1} = \alpha \sim 1$ , la distribution d'une particule typique du système à  $N$  particules (la première marginale de la fonction de répartition  $f_N$  en fait) converge presque partout vers la solution de l'équation de Boltzmann*

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \langle v, \nabla_x f \rangle = \alpha \mathcal{C}(f),$$

*avec condition initiale  $f_0$ , sur un intervalle de temps de la forme  $[0; t_0)$ , et  $t_0$  se comporte en  $\frac{C(\mu_0, \beta_0)}{\alpha}$ .*

En particulier, vu le comportement du temps  $t_0$ , on va par définition converger vers la solution de l'équation de Boltzmann en un temps plus court que le temps nécessaire pour avoir une première collision. Par ailleurs, le « particules indépendantes » que l'on utilise dans l'énoncé sera à comprendre, non pas comme une véritable indépendance (puisque les particules ne peuvent s'interpénétrer) mais plutôt comme une « corrélation minimale ». En effet, les particules ne peuvent pas se superposer.

### III. Schéma de la preuve du théorème de Lanford

#### III-A. L'équation de Liouville

L'équation de Liouville est l'équation de conservation pour un système de  $N$  particules, elle s'écrit de la manière suivante :  $\psi = \psi(t, x_1, v_1, \dots, x_N, v_N)$  est solution de l'équation de Liouville si

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + \sum_{k=1}^N \langle v_k, \nabla_{x_k} \psi \rangle = 0. \quad (\text{III.1})$$

Cette équation est très simple, et traduit le phénomène de transport libre. On introduit l'**espaces des configurations admissibles**, défini comme

$$\mathcal{D}_N := \left\{ (x_i, v_i)_{i=1, \dots, N} \mid \forall i \neq j, |x_i - x_j| > \varepsilon \right\}. \quad (\text{III.2})$$

Les conditions de réflexion spéculaire correspondront donc à des conditions de bord sur  $\partial \mathcal{D}_N$ . L'équation de la dynamique des sphères dures est, sans conditions de bord, est ainsi

$$\begin{cases} \frac{\partial f_N}{\partial t} + \sum_{k=1}^N \langle v_k, \nabla_{x_k} f_N \rangle = 0, \\ f_N : [0; T] \times \mathcal{D}_N \rightarrow \mathbb{R}_+ \end{cases}, \quad (\text{III.3})$$

La condition initiale associée est

$$f_{N,0} = \frac{1}{Z_N} \chi_{\mathcal{D}_N} \prod_{i=1}^N f_0(x_i, v_i),$$

où  $Z_N$  est une constante de normalisation choisie pour que  $f_{N,0}$  soit une densité de probabilité. C'est le  $\chi_{(X_i, V_i)_{i=1, \dots, N} \in \mathcal{D}_N}$  qui correspond à la corrélation minimale qui nous avons évoquée et qui vient casser l'indépendance.

En ce qui concerne les conditions de bord, c'est un peu plus délicat : l'ensemble  $\mathcal{D}_N$  ressemble à un gruyère. La condition s'exprime de la manière suivante : si à un instant  $t$  on a  $|X_i(t) - X_j(t)| = \varepsilon$ , on remplace

$$f_N(t, X_1, V_1, \dots, X_N, V_N) = f_N(t, X_1, V_1, \dots, X_i, V'_i, \dots, X_j, V'_j, \dots, X_N, V_N),$$

avec toujours la même définition pour  $V'_i$  et  $V'_j$ .

Pour l'instant, nous n'avons rien écrit de plus sur le plan conceptuel. Comme nous l'avons mentionné, il y a des trajectoires qui ne sont pas définies en tout temps, ou des données initiales qui mènent à des collisions multiples, mais ces configurations initiales sont en fait de mesure nulle dans  $\mathcal{D}_N$ , et ce qui nous autorise à travailler comme si tout se passait bien.

Une autre formulation de l'équation de Liouville est la suivante : si  $\{(X_i^0, V_i^0)\}_{i=1, \dots, N}$  est la configuration initiale, on demande que, pour tout temps  $t$ ,

$$f_N(t, X_1(t), V_1(t), \dots, X_N(t), V_N(t)) = f_{N,0}(X_1^0, V_1^0, \dots, X_N^0, V_N^0),$$

et l'équation de Liouville vient directement en dérivant par rapport au temps.

On demande l'échangeabilité des particules, ce qui revient à imposer, sur la condition initiale, que  $f_{N,0}$  soit invariante sous l'action de toute permutation  $\sigma$  des couples  $(X_i, V_i)$ . Les conditions de bord sont également invariantes sous ces permutations, de sorte qu'en tout temps  $t \geq 0$  la solution  $f_N$  vérifie également cette propriété d'invariance :

$$\forall \sigma \in \mathfrak{S}_N, f_N(t, X_1, V_1, \dots, X_N, V_N) = f_N(t, X_{\sigma(1)}, V_{\sigma(1)}, \dots, X_{\sigma(N)}, V_{\sigma(N)}).$$

Puisque l'on s'intéresse au comportement typique d'une particule, typique elle aussi, il est naturel d'introduire la **première marginale de  $f_N$** , noté  $f_N^{(1)}$  et définie par

$$f_N^{(1)}(t, X_1, V_1) := \int \chi_{\mathcal{D}_N} f_N(t, X_1, V_1, X_2, V_2, \dots, X_N, V_N) dX_2 dV_2 \dots dX_N dV_N, \quad (\text{III.4})$$

et, de manière plus générale, sa **marginale d'ordre  $s$**  par

$$f_N^{(s)} := \left( t, X_1, V_1, \dots, X_s, V_s \right) \int_{\mathcal{D}_N} \chi_{\mathcal{D}_N} f_N \left( t, X_1, V_1, X_2, V_2, \dots, X_N, V_N \right) dX_{s+1} dV_{s+1} \dots dX_N dV_N. \quad (\text{III.5})$$

Est-ce que l'on peut sortir sur  $f_N^{(1)}$  une équation qui ressemble à l'équation de Boltzmann ? En intégrant l'équation de Liouville par rapport aux  $(N-1)$ -dernières variables, on obtient

$$\int_{\mathcal{D}_N} \left( \frac{\partial f_N}{\partial t} + \sum_{k=2}^N \langle v_i, \nabla_{x_i} f_N \rangle \right) dX_2 dV_2, \dots, dX_N dV_N = 0,$$

et l'on remarque alors que, par intégration par parties du termes  $\sum_{k=1}^N \langle V_k, \nabla_{X_k} f_N \rangle$ , cette intégrale vaut 0, et, en somme, la première marginale vérifie l'équation du transport libre

$$\frac{\partial f_N^{(1)}}{\partial t} + \langle V_1, \nabla_{X_1} f_N^{(1)} \rangle = 0.$$

Sauf que là on a grugé, et que l'on a juste montré que l'on ne savait pas faire une intégration par parties : on travaille sur  $\mathcal{D}_N$ , pas sur  $\mathbb{T}^{dN} \times \mathbb{R}^{dN}$ , et il y a effectivement un terme de bord. Puisque l'on travaille dans l'intégrale à  $(X_1, V_1)$  fixé, on divise le bord de  $\left\{ (X_i, V_i)_{i=2, \dots, N}, (X_i, V_i)_{i=1, \dots, N} \in \mathcal{D}_N \right\}$  en  $N-1$  parties, et on récupère grâce à la formule de Stokes et en notant  $\sigma_{i,k}$  la mesure de surface sur le bord  $|X_i - X_k| = \varepsilon$  l'équation plus complète

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_N^{(1)}}{\partial t} + \langle V_1, \nabla_{X_1} f_N^{(1)} \rangle = & \\ & \sum_{i=2}^N \int_{|X_i - X_1| = \varepsilon} \left\langle V_i - V_1, \frac{X_i - X_1}{\varepsilon} \right\rangle f_N \left( t, X_1, V_1, \dots, X_N, V_N \right) dX_2 dV_2 \dots d\sigma_{i,1} dV_i dX_N dV_N \\ & + \sum_{i,j=2}^N \int_{|X_i - X_j| = \varepsilon} \left\langle V_i - V_j, \frac{X_i - X_j}{\varepsilon} \right\rangle f_N \left( t, X_1, V_1, \dots, X_N, V_N \right) dX_2 dV_2 \dots d\sigma_{i,j} dV_i dX_N dV_N, \end{aligned}$$

et le second terme est nul, par symétrie. De même, par symétrie, on a, pour tout  $i$  et pour tout  $j$ ,

$$\begin{aligned} \int_{|X_i - X_1| = \varepsilon} \left\langle V_i - V_1, \frac{X_i - X_1}{\varepsilon} \right\rangle f_N \left( t, X_1, V_1, \dots, X_N, V_N \right) dX_2 dV_2 \dots d\sigma_{i,1} dV_i dX_N dV_N = \\ \int_{|X_j - X_1| = \varepsilon} \left\langle V_j - V_1, \frac{X_j - X_1}{\varepsilon} \right\rangle f_N \left( t, X_1, V_1, \dots, X_N, V_N \right) dX_2 dV_2 \dots d\sigma_{j,1} dV_j dX_N dV_N. \end{aligned}$$

Finalement,  $f_N^{(1)}$  est solution de l'équation aux dérivées partielles

$$\frac{\partial f_N^{(1)}}{\partial t} + \langle V_1, \nabla_{X_1} f_N^{(1)} \rangle = (N-1) \int_{|X_2 - X_1| = \varepsilon} \left\langle V_2 - V_1, \frac{X_2 - X_1}{\varepsilon} \right\rangle f_N^{(2)} \left( t, X_1, V_1, X_2, V_2 \right) d\sigma_{1,2} dV_2. \quad (\text{III.6})$$

Par changement de variables, l'intégrale du membre de droite se ramène à une intégrale sur la sphère  $\mathbb{S}^{d-1}$  et se réécrit

$$(N-1)\varepsilon^{d-1} \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \langle V_2 - V_1, \omega \rangle f_N^{(2)} \left( t, X_1, V_1, X_1 + \varepsilon\omega, V_2 \right) d\omega dV_2,$$

où  $\sigma$  est la mesure de surface sur la sphère. On utilise le scaling de Boltzmann-Grad  $N\varepsilon^{d-1} \equiv \alpha$ . On voit le taux de saut de l'équation de Boltzmann apparaître naturellement.

On décompose ensuite  $\omega \mapsto \langle V_1 - V_1, \omega \rangle$  en ses parties positives et négatives. L'expression précédente devient

$$\alpha \left\{ \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \langle V_2 - V_1, \omega \rangle_+ f_N^{(2)} \left( t, X_1, V_1, X_1 + \varepsilon\omega, V_2 \right) d\omega dV_2 - \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \langle V_2 - V_1, \omega \rangle_- f_N^{(2)} \left( t, X_1, V_1, X_1 + \varepsilon\omega, V_2 \right) d\omega dV_2 \right\}.$$

Si  $\langle V_2 - V_1, \omega \rangle > 0$ , alors c'est que, localement

$$\frac{d}{dt}|X_2 - X_1|^2 > 0,$$

de sorte que les particules s'éloignent, et que l'on se trouve juste après une collision. Mais une collision correspond, dans notre modèle, à un bord du domaine, de sorte qu'en une collision on obtient

$$f_N^{(2)}(t, X_1, V_1, X_1 + \varepsilon\omega, V_2) = f_N^{(2)}(t, X_1, V_1', X_1 + \varepsilon\omega, V_2').$$

On obtient donc l'équation :

$$\frac{\partial f_N^{(1)}}{\partial t} + \langle v_1, \nabla_{x_1} f_N^{(1)} \rangle = \frac{(N-1)\varepsilon^{d-1}}{\alpha} \alpha \left\{ \int_{\mathbb{S}^{d-1}} \langle V_2 - V_1, \omega \rangle_+ \left( f_N^{(2)}(t, X_1, V_1', X_1 + \varepsilon\omega, V_2') - f_N^{(2)}(t, X_1, V_1, X_1 - \varepsilon\omega, V_2) \right) d\omega dV_2 \right\}.$$

Jusque là, la limite  $\varepsilon \rightarrow 0^+$  peut sembler gérable. Un peu plus gonflé, peut-on remplacer la marginale d'ordre  $s$  par le produit tensoriel  $(f_N^{(1)})^{\otimes s}$ ? En d'autres termes, peut-on justifier l'hypothèse de chaos moléculaire? Il faudrait déjà la justifier à l'instant initial  $t = 0$ .

En fait, il faut faire un calcul, mais on peut montrer l'estimation uniforme suivante, à l'instant initial : il existe une constante  $C$  telle que

$$\left\| \left( f_{N,0}^{(2)} - f_0^{\otimes 2} \right) \chi_{|X_1 - X_2| > \varepsilon} \right\|_{L^\infty} \leq C\varepsilon.$$

En d'autres termes, plus les molécules ont un rayon petit, plus cette hypothèse de chaos semble justifiée. En revanche, rien ne garantit que l'équation de Boltzmann propage ce chaos et que ce genre d'estimations soient vérifiées en tout temps.

Autre gros problème : a priori,  $f_N(t, \cdot)$  n'est qu'une fonction mesurable,  $L^p$ , et, pourtant, on en prend la trace, c'est-à-dire la restriction à un ensemble de mesure nulle. Est-ce une hérésie?

Afin d'étudier ces équations, nous allons utiliser une **technique de hiérarchie**.

### III-B. La hiérarchie BBGKY

Le principe sous-jacent d'une hiérarchie est inverse de celui de la démonstration du théorème de Cauchy-Kowalewskaya par séries majorantes, où transformer une équation non-linéaire en une infinité d'équations linéaires. Ici, nous allons montrer qu'une infinité d'équations linéaires se replie en une équation non-linéaire.

Reprenons : nous avons obtenu sur  $f_N^{(1)}$  une équation linéaire, mais qui dépend de  $f_N^{(2)}$ . Pour généraliser le procédé, nous allons employer la **hiérarchie BBGKY**, qui doit son acronyme à Bogoliubov, Born, Green, Kirkwood et Yvon. On réécrit de manière condensée

$$\frac{\partial f_N^{(1)}}{\partial t} + \langle V_1, \nabla_{X_1} f_N^{(1)} \rangle = \alpha C_{1,2} f_N^{(2)},$$

où  $C_{1,2}$  est un opérateur d'intégrale de bord.

En abordant de la même manière la marginale d'ordre 2, on obtient l'équation

$$\frac{\partial f_N^{(2)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^2 \langle V_i, \nabla_{X_i} f_N^{(2)} \rangle = \sum_{i=1}^2 C_{2,3}^i f_N^{(3)},$$

où  $C_{2,3}^i$  décrit la collision d'une particule nouvelle avec la  $i$ -ème particule.

En itérant on obtient, pour tout  $s \in \mathbb{N}$ ,  $s \leq N-1$ ,

$$\frac{\partial f_N^{(s)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \langle V_i, \nabla_{X_i} f_N^{(s)} \rangle = \sum_{i=1}^s C_{s,s+1}^i f_N^{(s+1)}. \quad (\text{III.7})$$

Enfin, on boucle le système d'équation en écrivant que  $f_N$  satisfait l'équation de Liouville. Donc jusqu'ici, à part rajouter un peu de bazar, on n'a pas fondamentalement changé quoique ce soit.

Cependant, la  $s$ -ième équation de cette hiérarchie est posée dans l'espace des phases  $\mathcal{D}_s$  (dont la définition s'intuit aisément à partir de celle de  $\mathcal{D}_N$ ). À  $s$  fixé, on va faire tendre  $N$  vers  $+\infty$ . Par le scaling de Boltzmann-Grad, le rayon des particules tend vers 0. Maintenant, l'espace des phases  $\mathcal{D}_s$  dépend de  $\varepsilon$  et, intuitivement

$$\mathcal{D}_s(\varepsilon) \xrightarrow{\varepsilon \rightarrow 0} (\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d)^s.$$

En fait, c'est justifier ce passage à la limite bien précis qui est l'étape clé de la démonstration. Mais supposons que ce passage soit valable. En a-t-on pour autant terminé? En fait, si on peut passer à la limite dans la  $s$ -ième équation, on obtient quelque chose de la forme

$$\frac{\partial f^{(s)}}{\partial t} + \sum_{i=1}^s \langle V_i, \nabla_{X_i} f^{(s)} \rangle = \bar{C}_{s,s+1} f^{(s+1)}, \quad (\text{III.8})$$

où  $\bar{C}_{s,s+1}$  est une somme de limites d'opérateurs d'intégrales de bord (plus précisément, il s'agit d'intégrales sur des variétés de codimension  $d$ ) qui modélisent les collisions des premières particules avec les particules restantes.

Sauf que, si  $f$  est solution de l'équation de Boltzmann sur  $\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d$ ,  $f^{\otimes s}$  est solution de cette hiérarchie limite! Pour cela, il faut mettre un peu les mains dans le cambouis et regarder précisément ce que deviennent les opérateurs de collision dans le passage à la limite. Donc avoir l'unicité de la limite pour la hiérarchie BBGKY et de la limite de la hiérarchie limite donne en corollaire le théorème de Lanford.

Étudions donc un peu plus en détails la dynamique des sphères dures et utilisons en particulier la **formule de Duhamel**. Soit  $\{\mathcal{S}_s(t)\}_{t \in \mathbb{R}}$  le groupe de transformations qui donne la solution de l'équation de transport dans  $\mathcal{D}_s$  : pour tout temps  $t$ ,  $\mathcal{S}_s(t) f_0^{(s)}$  donne la solution de l'équation de transport libre avec donnée initiale  $f_0^{(s)}$ . Cependant, il faut incorporer le phénomène de collisions. En utilisant la hiérarchie BBGKY ainsi que l'approximation  $\alpha = 1$ ,  $f_N^{(s)}(t)$  on arrive à l'équation

$$f_N^{(s)}(t) = \mathcal{S}_s(t) f_{N,0}^{(s)} + \int_0^t \mathcal{S}_s(t - t_{s+1}) C_{s,s+1} f_N^{(s+1)}(t_{s+1}) dt_{s+1}.$$

On est moyennement content. Reconnençons :

$$\begin{aligned} f_N^{(s)}(t, X_1(t), V_1(t), \dots, X_s(t), V_s(t)) &= \mathcal{S}_s(t) f_{N,0}^{(s)} + \\ &\int_0^t \mathcal{S}_s(t - t_{s+1}) C_{s,s+1} \left( \mathcal{S}_{s+1}(t_{s+1}) f_{N,0}^{(s+1)} + \right. \\ &\left. \int_0^{t_{s+1}} \mathcal{S}_{s+1}(t_{s+1} - t_{s+2}) C_{s+1,s+2} f_N^{(s+2)}(t_{s+2}) dt_{s+2} \right) dt_{s+1}. \end{aligned}$$

Et on continue. Jusqu'à ce que mort s'ensuive. On peut écrire l'équation finale sur la première marginale sous la forme condensée

$$f_N^{(1)}(t) = \mathcal{S}_1(t) f_{N,0}^{(1)} + \sum_{n=2}^N \int_{0 \leq t_n \leq \dots \leq t_2} dt_2 \dots dt_n \mathcal{S}_1(t - t_2) C_{1,2} S_2(t_2 - t_3) C_{2,3} \dots C_{n-1,n} \mathcal{S}_n(t_n) f_{N,0}^{(n)}. \quad (\text{FD})$$

Certainement ce n'est pas l'équation la plus ragoûtante que l'on puisse imaginer, mais nous allons pouvoir en donner, au moins, une interprétation géométrique relativement simple. **Nous avons donc transformé un opérateur différentiel en un opérateur qui agit uniquement sur la donnée initiale**, ce qui est en fait le principe général de la formule de Duhamel.

### III-C. Interprétation géométrique de la formule de Duhamel

**Deux objets combinatoires** Afin de mener à bien l'interprétation géométrique de l'expression que nous venons d'obtenir, il est nécessaire d'introduire deux notions :

- **La notion d'arbre de collision** : C'est un objet de combinatoire mais, rassurez-vous, de combinatoire simple. Une façon de comprendre (FD), c'est de lire la formule de gauche à droite : je pars avec un

première particule. Je remonte d'un temps  $t_2$ , puis je me prends une collision avec la particule 2. Je remonte d'un temps  $t_2 - t_3$ , puis je me prends une collision avec la particule 3, et ainsi de suite. Un arbre de collision est une collection  $\{a_i\}_{i \in \mathbb{N}_n}$  associée à une suite de temps  $\{t_i\}_{i \in \mathbb{N}_n}$ , où chaque  $a_i$  correspond au numéro de la particule frappée à l'instant  $t_i$ .

- **La notion de pseudo-trajectoire** : C'est une autre manière d'interpréter la formule de Duhamel. On se donne un arbre combinatoire  $\{a_i\}_{i \in \mathbb{N}_n}$ . On se donne un état  $(X_1, V_1)$ , une suite de vitesses  $\{V_i\}_{i \in \mathbb{N}_n}$ , ainsi qu'une suite d'angles de choc  $\{\omega_i\}_{i \in \mathbb{N}_n}$ . L'idée est de regarder toutes les trajectoires possibles qui ont pu mener à une particule dans l'état  $(X_1, V_1)$ .

On définit l'arbre de collisions par récurrence : à l'instant  $t_i$ , on ajoute la particule  $i$ , dans l'état  $(x_{a_i}(t_i) + \varepsilon\omega_i, V_i)$ . Il faut éventuellement faire un coup de scattering si la configuration est post-collisionnelle. On regarde ensuite, au bout d'un temps  $t$ , à quelle donnée initiale  $(X_n(0), V_n(0))$  nous sommes arrivés. Donc, en soit, ce n'est pas véritablement un objet physique, puisque l'on ajoute des particules au fur et à mesure que l'on remonte le temps. Cependant, c'est une manière somme toute naturelle de lire la formule de Duhamel : on regarde toutes les histoires possibles qui ont pu nous mener dans l'état actuel, et l'on pondère chacune de ces potentielles histoires par la donnée initiale. À l'aide de ce formalisme, on peut réécrire (FD) comme suit :

$$f_N^{(1)}(t) = \sum_{n=1}^N \left( (N - (n - 1)) \dots (N - 1) \varepsilon^{(d-1)(n-1)} \sum_{\text{arbre de collision de taille } n} \int_{t_i, v_i, \omega_i} \left( \prod_{i=2}^n \langle v_i - v_{a_i}(t_i), \omega_i \rangle \right) f_{N,0}^{(n)}(X_n(0), V_n(0)) \right), \quad (\text{III.9})$$

où la dépendance des différentes quantités intégrées par rapport à l'arbre de collision est implicite. On obtient donc une hiérarchie d'équations pour la dynamique des sphères dures.

Ça, c'est le modèle obtenu pour le modèle des sphères dures. Peut-on faire la même chose pour l'équation de Boltzmann? Oui, avec exactement le même procédé, à ceci près qu'une nouvelle particule ne sera pas ajoutée en la position  $x_{a_i}(t_i) + \varepsilon\omega_i$  mais simplement en la position  $x_i$ , et qu'entre deux temps de collision, le transport a lieu dans  $\mathcal{D}_s(\varepsilon)$  dans le premier cas, et ici dans  $(\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d)^s$ . On obtient ainsi une nouvelle hiérarchie d'équations, aptement nommée « hiérarchie de Boltzmann ».

La question est donc de savoir si chacune des équations marginales de la dynamique des sphères dures converge, quand  $N \rightarrow +\infty$ , vers l'équation correspondante dans la hiérarchie de Boltzmann.

**Contrôle géométrique des recollision** L'étape de la preuve est le contrôle des recollisions ; autrement dit, deux particules qui se cognent à un moment risquent-elles de se rencontrer de nouveau dans le futur? Dans tout l'espace, deux particules qui se cognent ne se rencontrent plus jamais. Donnons nous  $(X_1, V_1)$  et  $(X_2, V_2)$  deux particules. Maintenant, avec notre technique d'arbre de collisions, supposons avoir créé une nouvelle particule  $(X_3, V_3)$  en  $X_2 + \varepsilon_i\omega_i$ , c'est-à-dire en contact avec  $X_2$ . A priori, si on se trouve dans une situation pré-collisionnelle,  $(X_2, V_2)$  et  $(X_3, V_3)$  ne se rencontreront plus jamais, mais se peut-il que  $(X_3, V_3)$  aille taper  $(X_1, V_1)$  ou que  $(X_2, V_2)$  aille taper  $(X_3, V_3)$ ? Si tel était le cas, on pourrait avoir de nouveau collision entre  $(X_2, V_2)$  et  $(X_3, V_3)$ . Pour que cela se produise, il faudrait qu'il existe un réel  $\gamma \geq 0$  tel que

$$\left| (X_3 - \gamma V_3) - (X_1 - \gamma V_1) \right| \leq \varepsilon.$$

Autrement dit, si  $\left| X_3 - X_1 \right|$  est grand,  $V_3 - V_1$  doit être dans un cône d'ouverture  $\varepsilon$ , donc de volume  $\varepsilon^{d-1}$ . Si  $\left| X_3 - X_1 \right|$  est petit, les particules vont vite se taper. Notons que ce genre d'arguments ne marchent pas dès que l'on sort du cadre du tore ou de l'espace entier. Nous reviendrons sur ce problème plus tard.

### III-D. L'apparition de l'irréversibilité

Pour expliquer où l'irréversibilité apparaît, il nous faut d'abord préciser l'espace des bonnes configurations, celles pour lesquelles nos raisonnements peuvent s'appliquer : pour un paramètre  $\varepsilon_0$  tel

que  $0 \ll \varepsilon \ll \varepsilon_0 \ll 1$ , avec  $s$  particules, on introduit l'espace des bonnes configurations, en abrégant  $(x_1, v_1, \dots, x_s, v_s)$  en  $(X_s, V_s)$  :

$$\mathcal{G}_s := \left\{ (X_s, V_s), \forall t \geq 0, \forall i, \forall j, |x_i - x_j - (v_i - v_j)t| \geq \varepsilon_0 \right\}. \quad (\text{III.10})$$

Il s'agit donc des configurations formées de particules qui, dans le passé, ne sont pas rentrées en collision. Donc des particules qui ne sont pas corrélées.

Pourquoi cet ensemble est-il important? Convenons de noter  $\bar{\cdot}$  les configurations pour l'équation de Boltzmann, et sans barre pour la dynamique des sphères dures. Si l'on considère un élément  $\bar{Z}_s = (\bar{X}_s, \bar{V}_s) \in \mathcal{G}_s$  et un autre  $Z_s = (X_s, V_s) \in \mathcal{G}_s$  tel que

$$|\bar{X}_s - X_s| \leq C\varepsilon$$

pour une certaine constante  $C$ , alors, si par la méthode de recollision on ajoute à l'instant  $t_{s+1}$  une particule via des paramètres  $(V_{s+1}, \omega_{s+1})$  en  $Z_s$ , on peut démontrer qu'en se fixant un temps  $\delta > 0$ , d'une part, on ne peut avoir recollision et, d'autre part, qu'à partir d'un temps  $\delta$ , la configuration  $\bar{Z}_{s+1}$  (c'est-à-dire la configuration  $\bar{Z}_s$  à laquelle on a rajouté  $Z_{s+1}$  et que l'on a laissée évoluer pendant le temps  $\delta$ ) est une bonne configuration pour  $s+1$ -particules. De plus, on peut établir que l'on a  $|X_{s+1} - \bar{X}_{s+1}| \leq C\varepsilon$ . Ce que nous venons d'écrire est vrai si l'angle d'impact  $\omega_{s+1}$  et la vitesse  $v_{s+1}$  évitent un ensemble interdit, noté  $B_{s+1}$ , que l'on peut choisir de mesure petite, et même de la forme

$$|B_{s+1}| \leq C \left( \left( \frac{\varepsilon_0}{\delta} \right)^{d-1} + \left( \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0} \right)^d \right).$$

La mesure de cet ensemble interdit (qui sert à éviter les recollisions) ne dépend que de la dynamique de Boltzmann. Dit à la louche, on veut que les particules évitent de toutes se coller au même endroit et, à part sur un ensemble de mesure petite, les deux dynamiques impliquées se ressemblent beaucoup.

REMARQUE. Comme prévu, revenons sur ces questions de géométrie. Dans un domaine quelconque, la question est essentiellement ouverte, pour la simple et bonne raison qu'il n'existe pas de contrôle géométrique aussi élémentaire des recollisions, les questions devenant alors des problèmes de systèmes dynamiques très dures.

De manière plus précise, ces méthodes, que nous n'avons ici qu'esquissées, permettent de montrer une version précise du théorème de Lanford : on a convergence de chaque marginale sur un ensemble de bonne configuration. En notant comme d'habitude  $f$  la solution de l'équation de Boltzmann et  $f^{\otimes s}$  sa tensorisée  $s$  fois<sup>1</sup>, on a

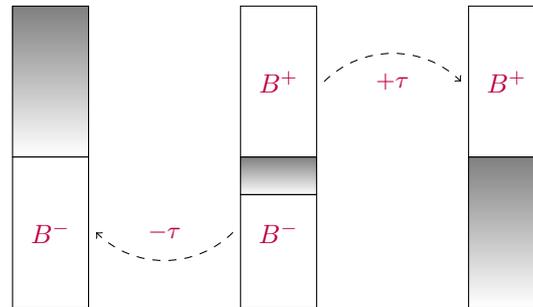
THÉORÈME III.1. *Si on part d'un système de  $N$  particules, dont les états initiaux sont des variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées suivant une distribution  $f_0$ , si  $f$  désigne la solution de l'équation de Boltzmann avec donnée initiale  $f_0$ , alors, pour tout  $s \in \mathbb{N}$ , il existe une constante  $C(s)$ , un temps  $\delta > 0$ , une constante strictement positive  $\ell$  et un ensemble  $\mathcal{G}_s$  dont le complémentaire a une mesure petite tels que pour tout  $t \in [0; \delta)$ ,*

$$\left\| \left( f_N^{(s)}(t) - f^{\otimes s}(t) \right) \chi_{\mathcal{G}_s} \right\|_{L^\infty} \leq C(s)\varepsilon^\ell.$$

D'où vient donc l'irréversibilité? Une question naturelle est donc la suivante : peut-on, partant d'un instant  $t$ , repartir en arrière par la même construction? Essayons d'adapter le même procédé : on part d'une configuration à  $s+n$  éléments à un temps  $t$ . On essaie de remonter à une configuration à  $s$  éléments à un temps  $t-t'$ . Le problème, si l'on fait cela, c'est que, pour aboutir à une bonne configuration à  $s+n$  éléments, il faut que les particules de la configuration à  $s$  éléments se collisionnent en un temps  $t'$ . Sauf que, si l'on part d'une bonne configuration à l'instant  $t-t'$ , c'est que les particules ne peuvent pas, par définition de  $\mathcal{G}_s$ , se collisionner... En d'autres termes, en essayant de remonter dans

1. Rappelons que cela signifie que, pour tout  $(t, x_1, v_1, \dots, x_s, v_s)$ ,  $f^{\otimes s}(t, x_1, v_1, \dots, x_s, v_s) = \prod_{i=1}^s f(t, x_i, v_i)$ .

le temps, on sort du bon ensemble de convergence. Afin de clarifier les choses, on note, dans le schéma suivant,  $B^+$  la boîte qui contient toutes les bonnes configurations, c'est-à-dire à partir desquelles on ne peut remonter le temps, et  $B^-$  les mauvaises configurations, c'est-à-dire celles à partir desquelles on peut remonter dans le temps et assurer une convergence. Les zones grises correspondent aux zones où l'on ne peut rien dire de la convergence : partant de cette configuration, on ne sait rien dire. Nous avons démontré que ces ensembles restent très petits. Au temps  $t = 0$ , on converge hors d'un tout petit ensemble, gris. Partant de  $B^-$ , on sait qu'on ne converge pas, mais que l'on peut remonter d'un temps  $\tau$  dans le passé et tomber dans une zone où l'on peut montrer qu'il y a convergence :



Ainsi, le passage à la limite, de la dynamique des sphères dures vers l'équation de Boltzmann, ne voit pas l'endroit où les particules sont trop fortement corrélées. L'entropie, dont on a l'impression qu'elle est dissipée dans un gaz, est en fait transvasée dans la partie invisible aux yeux de l'équation de Boltzmann, c'est-à-dire dans la partie où l'hypothèse de chaos moléculaire n'est plus vérifiée, mais qui est de mesure extrêmement petite.