

**VALIDITÉ DE LA THÉORIE CINÉTIQUE DES GAZ :
AU-DELÀ DE L'ÉQUATION DE BOLTZMANN**
[d'après T. Bodineau, I. Gallagher, L. Saint-Raymond, S. Simonella]

par François Golse

Introduction

On doit à MAXWELL (1860, 1867) et BOLTZMANN (1872, 1964) la fondation de la théorie cinétique des gaz. Quoique l'idée d'une description particulière de la matière remonte à l'Antiquité, Maxwell est le premier à faire appel à des notions de statistique afin de mettre cette description en équation. Le caractère novateur de cette entreprise apparaît très clairement à la lecture de l'introduction de (MAXWELL, 1867) : la liste exhaustive des précurseurs cités par Maxwell est brève — Lucrèce⁽¹⁾ (I^{er} siècle av. J.-C.), D. Bernoulli (1738), Le Sage (1761), Herapath (1847), avant les travaux évidemment fondamentaux de Joule (1848) et Clausius (1857). Mais ce n'est qu'au XX^e siècle que l'on comprend que la théorie cinétique des gaz peut être déduite rigoureusement des équations de la mécanique classique appliquées à un système de particules sphériques identiques interagissant lors de collisions élastiques dans une certaine limite asymptotique. Hilbert est le premier à avoir formulé cette question comme un problème mathématique (cité dans son sixième problème sur l'« axiomatisation de la physique » (HILBERT, 1902)). Mais le texte fondamental identifiant clairement le régime asymptotique à considérer est l'article (GRAD, 1949). Après les articles précurseurs (GALLAVOTTI, 1969) et (CERCIGNANI, 1972), LANFORD (1975) donne la première justification rigoureuse de l'équation de Boltzmann comme conséquence du principe fondamental de la dynamique (c'est-à-dire la deuxième loi de Newton) appliqué à chaque molécule de gaz.

⁽¹⁾Cf. par exemple « Nam quoniam per inane uagantur, cuncta necessest | Aut gravitate sua ferri primordia rerum | Aut ictu forte alterius. Nam < cum > cita saepe | Obuia conflixere, fit ut diuersa repente | Dissiliant [...] » (Car puisqu'il errent à travers le vide, il faut que les principes des choses soient tous emportés soit par leur propre poids, soit encore par le choc d'un autre atome). De Rerum Natura II, v. 83–87, trad. A. Ernout, Les Belles Lettres, Paris, 2009. Ces vers décrivent précisément le processus physique sous-jacent à l'équation de Boltzmann (19) ci-dessous. Voici ce qu'en dit MAXWELL (1867) : « [...] he describes the atoms as all moving downwards with equal velocities, which, at quite uncertain times and places, suffer an imperceptible change, just enough to allow of occasional collisions taking place between the atoms. »

Le théorème de Lanford a été étendu dans diverses directions depuis 1975 : voir par exemple (AYI, 2017; GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et TEXIER, 2013; ILLNER et PULVIRENTI, 1989; KING, 1975). Toutefois, un certain nombre de questions essentielles demeuraient ouvertes même après les plus récents de ces travaux. Ces questions sont principalement de deux types bien distincts. D'une part, sur le plan mathématique, le théorème de Lanford exprime qu'une certaine quantité converge vers une solution de l'équation de Boltzmann. Peut-on alors estimer l'erreur entre la limite, c'est-à-dire la solution de l'équation de Boltzmann, et la quantité qui l'approche? D'autre part, la convergence démontrée par Lanford a lieu sur un intervalle de temps assez restreint — on trouvera une discussion assez détaillée de ce point par Lanford lui-même dans (LANFORD, 1976) — alors que l'équation de Boltzmann possède des solutions globales en temps pour des données initiales extrêmement générales (voir (DiPERNA et LIONS, 1989), ainsi que l'exposé (GÉRARD, 1988) dans ce même séminaire). En pratique, les spécialistes de gaz raréfiés utilisent d'ailleurs l'équation de Boltzmann ou certains de ses avatars pour des simulations numériques sur des plages de temps beaucoup plus longues que celle prédite par (LANFORD, 1975). Peut-on alors démontrer la validité de l'équation de Boltzmann sur des intervalles de temps arbitrairement longs?

Il semble probable qu'une réponse complète à cette dernière question devrait mettre en jeu de nouvelles idées par rapport à celles de (LANFORD, 1975) — voir toutefois la section 6.

En revanche, quant aux questions du premier type, des progrès spectaculaires ont été accomplis récemment dans une série de travaux importants (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2018, 2020a, 2023). Citons également les articles (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2020b, 2022c), qui étendent la théorie des fluctuations étudiée dans (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2018, 2020a, 2023) par delà le temps de Lanford, mais dans une situation particulière, celle des fluctuations autour d'un état d'équilibre. On évoquera brièvement ces derniers travaux dans la section 6 de cet exposé.

Il est évidemment impossible de rendre compte en quelques dizaines de pages de l'ensemble des résultats obtenus et du détail des méthodes mathématiques employées dans ces articles, qui sont malheureusement d'une grande technicité compte tenu de la difficulté du problème.

Toutefois, dans les contributions de Bodineau, Gallagher, Saint-Raymond et Simonella au problème de la justification rigoureuse de la théorie cinétique des gaz, un rôle essentiel semble dévolu à une nouvelle équation de type Hamilton–Jacobi « fonctionnelle », équation satisfaite par une notion de « fonction génératrice des cumulants » dans la même limite que celle étudiée par Lanford.

C'est donc sur cette équation de Hamilton–Jacobi, et sur ses applications à la description statistique de la dynamique des gaz, que l'on a choisi de centrer cet exposé. On trouvera une présentation sensiblement différente de ces mêmes travaux dans la

conférence plénière de Laure Saint-Raymond au Congrès international des mathématiciens (2022) : voir (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022b) — présentation dont on s'est toutefois inspiré ici pour évoquer certaines des méthodes de démonstration utilisées dans les travaux cités plus haut.

Les questions étudiées dans le présent exposé font évidemment appel à plusieurs notions fondamentales relatives à la justification rigoureuse par Lanford de l'équation de Boltzmann, dont un compte-rendu très précis et détaillé se trouve dans (GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et TEXIER, 2013) (voir également (CERCIGNANI, ILLNER et PULVIRENTI, 1994)), et qui a déjà fait l'objet d'une présentation à ce même séminaire (GOLSE, 2014). On a essayé autant que possible d'éviter les redites entre ce précédent exposé et le texte qui va suivre. Un certain nombre de questions, comme par exemple les « paradoxes » liés à l'irréversibilité, ont déjà été décrits et commentés dans (GOLSE, 2014) ; on a délibérément choisi de ne pas y revenir, et d'y renvoyer le lecteur chaque fois que cela était possible.

Je tiens à remercier Thierry Bodineau, Isabelle Gallagher, Laure Saint-Raymond et Sergio Simonella de m'avoir communiqué une première version de leur article (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022b), ainsi que de leurs suggestions pendant la préparation de cet exposé.

1. Limite de Boltzmann–Grad et théorème de Lanford

Commençons par rappeler dans cette section quelques notions de base, déjà présentées dans (GOLSE, 2014), mais indispensables pour la suite.

1.1. La dynamique moléculaire

Considérons un gaz monoatomique, que l'on voit comme un système de N molécules qui sont des boules de diamètre $\varepsilon \in]0, \frac{1}{2}[$. La position et la vitesse de la k -ième boule à l'instant t sont notées respectivement $x_k(t)$ et $v_k(t) \in \mathbf{R}^3$ où $k = 1, \dots, N$. Dans toute la suite, on supposera pour simplifier que l'évolution du gaz est spatialement périodique, de sorte que $x_k(t) \in \mathbf{T}^3 = \mathbf{R}^3 / \mathbf{Z}^3$. En l'absence de force extérieure agissant sur les molécules, la deuxième loi de Newton écrite pour chaque molécule de gaz est ⁽²⁾

$$\frac{dx_k}{dt}(t) = v_k(t), \quad \frac{dv_k}{dt}(t) = 0, \quad \text{si } \text{dist}(x_k(t), x_l(t)) > \varepsilon \text{ pour tout } l \neq k. \quad (1)$$

⁽²⁾Pour $x, y \in \mathbf{T}^3$, on note $\text{dist}(x, y) = \min\{|X - Y| \text{ t.q. } X, Y \in \mathbf{R}^3, X = x \text{ et } Y = y \text{ mod. } \mathbf{Z}^3\}$.

Au cours d'une collision entre la k -ième et la l -ième molécule à un instant t^* , les positions de ces molécules varient continûment en temps, c'est-à-dire que

$$\text{dist}(x_k(t^*-0), x_l(t^*-0)) = \varepsilon \implies x_k(t^*+0) = x_k(t^*-0) \quad \text{et} \quad x_l(t^*+0) = x_l(t^*-0), \quad (2)$$

tandis que leurs vitesses varient de façon discontinue comme suit :

$$\begin{aligned} v_k(t^*+0) &= v_k(t^*-0) - ((v_k(t^*-0) - v_l(t^*-0)) \cdot n_{kl}(t^*)) n_{kl}(t^*), \\ v_l(t^*+0) &= v_l(t^*-0) + ((v_k(t^*-0) - v_l(t^*-0)) \cdot n_{kl}(t^*)) n_{kl}(t^*), \end{aligned} \quad (3)$$

en notant ⁽³⁾ $n_{kl}(t^*) := (x_l(t^*+0) - x_k(t^*+0))/\varepsilon$. On notera dans la suite de cet exposé

$$\Lambda_N^\varepsilon := \{(x_1, \dots, x_N) \in (\mathbf{T}^3)^N \text{ t.q. } \text{dist}(x_k(t), x_l(t)) > \varepsilon \text{ pour } k, l = 1, \dots, N, k \neq l\}$$

— il s'agit de l'ensemble des positions physiquement admissibles pour les molécules, qui ne peuvent s'interpénétrer — et $\Gamma_N^\varepsilon := \Lambda_N^\varepsilon \times (\mathbf{R}^3)^N$, l'espace des phases à N particules. On suppose connues les positions et les vitesses de chaque molécule à l'instant initial $t = 0$, soit

$$x_k(0) = x_k^{in}, \quad v_k(0) = v_k^{in}, \quad k = 1, \dots, N \quad (4)$$

avec $(x_1^{in}, v_1^{in}, \dots, x_N^{in}, v_N^{in}) \in \Gamma_N^\varepsilon$, et on s'intéresse aux solutions

$$t \mapsto (x_1(t), v_1(t), \dots, x_N(t), v_N(t)) \in \Gamma_N^\varepsilon$$

de ce problème de Cauchy (1)-(2)-(3) avec la condition initiale (4). Notons m_N la mesure de Lebesgue sur $(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^N$.

Proposition 1.1. *Soient $N \geq 2$ et $\varepsilon \in]0, \frac{1}{2}[$ fixés. Il existe $E \subset \overline{\Gamma_N^\varepsilon}$ tel que $m_N(E) = 0$ et vérifiant la propriété suivante : pour tout $(x_1^{in}, v_1^{in}, \dots, x_N^{in}, v_N^{in}) \in \overline{\Gamma_N^\varepsilon} \setminus E$, le problème de Cauchy (1)-(2)-(3)-(4) admet une unique solution*

$$t \mapsto (x_1(t), v_1(t), \dots, x_N(t), v_N(t)) =: S_t^{N,\varepsilon}(x_1^{in}, v_1^{in}, \dots, x_N^{in}, v_N^{in})$$

définie pour tout $t \in \mathbf{R}$. Ceci définit $S_t^{N,\varepsilon}$ comme flot sur $\overline{\Gamma_N^\varepsilon} \setminus E$: pour tout $t \in \mathbf{R}$, on a $S_t^{N,\varepsilon}(\overline{\Gamma_N^\varepsilon} \setminus E) \subset \overline{\Gamma_N^\varepsilon} \setminus E$ et $S_{t+s}^{N,\varepsilon} = S_t^{N,\varepsilon} \circ S_s^{N,\varepsilon}$. D'autre part, la mesure m_N est invariante sous l'action de $S_t^{N,\varepsilon}$, c'est-à-dire que $m_N(S_t^{N,\varepsilon}(A)) = m_N(A)$ pour tout $A \subset \overline{\Gamma_N^\varepsilon}$ mesurable et tout $t \in \mathbf{R}$.

Voir (ALEXANDER, 1976), ou encore le chapitre 4 (en particulier la Proposition 4.1.1) de (GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et TEXIER, 2013). Ce résultat est décrit avec un peu plus de détails dans la section 3.1 de (GOLSE, 2014).

Dans la suite, il sera commode de noter $z_k^{in} := (x_k^{in}, v_k^{in})$ et $z_k(t) := (x_k(t), v_k(t))$.

⁽³⁾ Soient $x, y \in \mathbf{T}^3$ tels que $r = \text{dist}(x, y) < \frac{1}{2}$. Il existe un unique vecteur unitaire n dans \mathbf{R}^3 tel que $y = x + rn$. Ce vecteur sera noté $n = (y - x)/r$ ou $(y - x)/|y - x|$ dans la suite de cet exposé.

1.2. Ensemble grand-canonique et loi d'échelle de Boltzmann–Grad

La théorie cinétique des gaz est obtenue à partir du système (1)-(2)-(3) dans un régime asymptotique très particulier, connu sous le nom de loi d'échelle de Boltzmann–Grad. On y suppose que le diamètre des molécules ε est très petit par rapport au diamètre du domaine \mathbf{T}^3 où elles sont confinées, tandis que leur nombre N est très grand. La quantité ε^2 est donc homogène à une surface — $\frac{1}{4}\pi\varepsilon^2$ est la surface de la section équatoriale d'une molécule — de sorte que la quantité $\ell := \text{Vol}(\mathbf{T}^3)/(N\varepsilon^2)$ est homogène à une longueur, proportionnelle au libre parcours moyen — c'est-à-dire à la longueur moyenne séparant deux collisions subies par la même molécule typique dans le gaz. La loi d'échelle de Boltzmann–Grad postule que cette longueur est du même ordre de grandeur que le diamètre du domaine spatial \mathbf{T}^3 . En particulier, le volume $(N-1)\frac{4}{3}\pi\varepsilon^3$ de l'espace dans lequel aucun des points $x_k(t)$ ne peut pénétrer (dit « volume exclu », rempli par les $N-1$ autres molécules) est $O(\varepsilon)$ et donc négligeable dans la limite de Boltzmann–Grad. C'est pourquoi la théorie cinétique des gaz de Maxwell et Boltzmann, obtenue dans cette limite, ne peut décrire que des gaz parfaits.

Contrairement au cadre considéré dans (CERCIGNANI, ILLNER et PULVIRENTI, 1994; GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et TEXIER, 2013; LANFORD, 1975) ainsi que dans (GOLSE, 2014), où N est un paramètre entier que l'on fait tendre vers l'infini⁽⁴⁾, on supposera ici que N , ainsi que les positions et les vitesses initiales des N molécules sont des variables aléatoires. Soit une suite $(\phi_n)_{n \geq 0}$ où $\phi_n \in C_b((\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n)$ pour tout $n \geq 1$, et où $\phi_0 \in \mathbf{R}$. De façon équivalente, on considère la fonction définie sur l'espace grand-canonique Ω par

$$\Phi : \Omega := \bigcup_{n \geq 0} \{n\} \times (\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n \ni (N, z_1, \dots, z_N) \mapsto \sum_{n \geq 0} \mathbf{1}_{N=n} \phi_n(z_1, \dots, z_n), \quad (5)$$

et on définit sa moyenne grand-canonique par la formule

$$\mathbb{E}_\varepsilon(\Phi) := \frac{1}{\mathcal{Z}_\varepsilon} \sum_{n \geq 0} \frac{\mu_\varepsilon^n}{n!} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n} \phi_n(Z_n) \mathbb{F}_n^{\text{in}}(Z_n) dZ_n,$$

où on a noté $Z_n := (z_1, \dots, z_n)$, où $\mu_\varepsilon > 0$ est un paramètre qui sera précisé plus loin, et où

$$\mathbb{F}_n^{\text{in}}(Z_n) := \prod_{i=1}^n f^{\text{in}}(z_i) \prod_{1 \leq j < k \leq n} \mathbf{1}_{\text{dist}(x_j, x_k) > \varepsilon}. \quad (6)$$

On définit de la sorte une mesure de probabilité borélienne \mathbb{P}_ε sur Ω , et le terme « ensemble grand-canonique » désigne le couple $(\Omega, \mathbb{P}_\varepsilon)$.

⁽⁴⁾Formalisme dit de l'« ensemble canonique ». Dans (CERCIGNANI, ILLNER et PULVIRENTI, 1994; GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et TEXIER, 2013; GOLSE, 2014; LANFORD, 1975), seules les positions et les vitesses initiales des N molécules sont distribuées aléatoirement.