



HAL
open science

Validité de la théorie cinétique des gaz: au-delà de l'équation de Boltzmann

François Golse

► **To cite this version:**

François Golse. Validité de la théorie cinétique des gaz: au-delà de l'équation de Boltzmann. 2023. hal-04185630

HAL Id: hal-04185630

<https://polytechnique.hal.science/hal-04185630v1>

Preprint submitted on 23 Aug 2023

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

**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**

Table des matières

Introduction.....	1
1. Limite de Boltzmann–Grad et théorème de Lanford.....	3
2. Cumulants et équation de Hamilton–Jacobi.....	18
3. Grandes déviations.....	32
4. Fluctuations.....	37
5. Esquisse de preuve pour le Théorème 2.6.....	45
6. Épilogue : par-delà le temps de Lanford.....	50
Références.....	51

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

1. Cf. par exemple « Nam quoniam per inane uagantur, cuncta necessesit | Aut gravitate sua ferri primordia rerum | Aut ictu forte alterius. Nam < cum > cita saepe | Obuia confligere, 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. »

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.

Le théorème de Lanford a été étendu dans diverses directions depuis 1975 : voir par exemple (KING, 1975 ; ILLNER et PULVIRENTI, 1989 ; GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et TEXIER, 2013 ; AYI, 2017). 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 à peu près évident qu'une réponse complète à cette dernière question devra nécessairement faire appel à des méthodes mathématiques très différentes de celles de (LANFORD, 1975), et qui restent probablement à inventer.

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, 2022d). 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, 2022d) par delà le temps de Lanford, mais dans une situation extrêmement 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, 2022a) — 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, 2022a), 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 $\epsilon \in]0, \frac{1}{2}[$. 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⁾

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

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

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

tandis que leurs vitesses varient de façon discontinue comme suit :

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

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

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

— il s'agit de l'ensemble des positions physiquement admissibles pour les molécules, qui ne peuvent s'interpénétrer — et $\Gamma_N^\epsilon := \Lambda_N^\epsilon \times (\mathbf{R}^3)^N$, 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

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

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

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

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

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

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

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

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.

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 $z_k(t) := (x_k(t), v_k(t))$.

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 — $\frac{1}{4}\pi\epsilon^2$ est la surface de la section équatoriale d'une molécule — de sorte que la quantité $\ell := \text{Vol}(\mathbf{T}^3)/(N\epsilon^2)$ 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 $(N-1)\frac{4}{3}\pi\epsilon^3$ 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 $O(\epsilon)$ 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 (LANFORD, 1975 ; CERCIGNANI, ILLNER et PULVIRENTI, 1994 ; GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et TEXIER, 2013) 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

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

et on définit sa moyenne grand-canonique par la formule

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

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

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

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

4. Formalisme dit de l'« ensemble canonique ».

Dans cette formule, f^{in} est la fonction de distribution (à une molécule) qui joue le rôle de condition initiale dans l'équation de Boltzmann. Sans perte de généralité, on supposera que f^{in} est une densité de probabilité sur l'espace des phases $\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$. Notons que

$$\frac{4}{3}\pi n\epsilon^3 > 1 \implies \prod_{1 \leq j < k \leq n} \mathbf{1}_{\text{dist}(x_j, x_k) > \epsilon} = 0,$$

de sorte que la somme définissant $\mathbb{E}_\epsilon(\Phi)$ ne comporte qu'un nombre fini de termes non nuls. Le réel \mathcal{Z}_ϵ est défini par la condition de normalisation $\mathbb{E}_\epsilon(1) = 1$:

$$\mathcal{Z}_\epsilon := \sum_{n \geq 0} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n} \mathbb{F}_n^{in}(Z_n) dZ_n.$$

LEMME 1.2. — *Supposons que la densité de probabilité f^{in} appartient à l'espace $L^\infty(\mathbf{T}^3; L^1(\mathbf{R}^3))$ et que $\epsilon^3 \mu_\epsilon \rightarrow 0$ quand $\epsilon \rightarrow 0^+$. Alors*

$$\mathbb{E}_\epsilon(N) \sim \mu_\epsilon \quad \text{lorsque } \epsilon \rightarrow 0^+,$$

où N désigne la fonction Φ sur l'espace grand-canonique Ω associée par la formule (5) à la suite de fonctions $(\phi_n)_{n \geq 0}$ telle que $\phi_n(z_1, \dots, z_n) = n$ pour tout $n \geq 0$ et tous $z_1, \dots, z_n \in \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$.

Démonstration. — Posons $C := \|f^{in}\|_{L^\infty(\mathbf{T}^3; L^1(\mathbf{R}^3))}$, et

$$\begin{aligned} u_n &:= \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n} \mathbb{F}_n^{in}(Z_n) dZ_n \\ &\leq \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n} \mathbb{F}_{n-1}^{in}(Z_{n-1}) dZ_{n-1} \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} f^{in}(z_n) dz_n \leq u_{n-1} \leq 1. \end{aligned}$$

D'autre part

$$\begin{aligned} u_n &\geq \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^{n-1}} \left(\int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \left(1 - \sum_{j=1}^{n-1} \mathbf{1}_{|x_n - x_j| \leq \epsilon} \right) f^{in}(z_n) dz_n \right) \mathbb{F}_{n-1}^{in}(Z_{n-1}) dZ_{n-1} \\ &\geq u_{n-1} \left(1 - \frac{4}{3}\pi C(n-1)\epsilon^3 \right). \end{aligned}$$

Donc

$$\mathbb{E}_\epsilon(N) \leq \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} n = \frac{\mu_\epsilon}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^{n-1}}{(n-1)!} = \mu_\epsilon,$$

tandis que, comme $u_{n-1} \leq u_{n-2}$

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\epsilon(N) &\geq \frac{\mu_\epsilon}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 0} \frac{\mu_\epsilon^{n-1}}{n!} n u_{n-1} \left(1 - \frac{4}{3}\pi C(n-1)\epsilon^3 \right) \\ &\geq \frac{\mu_\epsilon}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^{n-1} u_{n-1}}{(n-1)!} - \frac{4}{3}\pi C \epsilon^3 \frac{\mu_\epsilon^2}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 2} \frac{\mu_\epsilon^{n-2} u_{n-2}}{(n-2)!} = \mu_\epsilon \left(1 - \frac{4}{3}\pi C \epsilon^3 \mu_\epsilon \right). \end{aligned}$$

□

Remarque 1.3. — En supposant que $\mu_\epsilon \rightarrow +\infty$ lorsque $\epsilon \rightarrow 0^+$ et sous les mêmes hypothèses que dans le Lemme 1.2, on a $\mathcal{Z}_\epsilon \sim e^{\mu_\epsilon}$. La démonstration de ce fait, laissée au lecteur, suit de près celle du lemme.

Dans le formalisme grand-canonique, on réalisera donc la loi d'échelle de Boltzmann–Grad en posant

$$\mu_\epsilon = \epsilon^{-2}, \quad \text{de sorte que } \epsilon^2 \mathbb{E}_\epsilon(N) \rightarrow 1 \text{ lorsque } \epsilon \rightarrow 0^+.$$

Observons d'ailleurs que

$$\mathbb{P}_\epsilon(\{N = n\}) = \mathbb{E}_\epsilon(\mathbf{1}_{N=n}) = \mathcal{Z}_\epsilon^{-1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n} \mathbb{F}_n^{\text{in}}(Z_n) dZ_n,$$

formule qui évoque bien sûr la loi de Poisson. (Si on fait $\epsilon = 0$ dans cette formule, et que l'on pose $\mu_0 = \lambda$ — ce qui contredit évidemment la loi d'échelle de Boltzmann–Grad — on trouve en effet que $\mathcal{Z}_0 = e^\lambda$, puis que $\mathbb{P}_0(\{N = n\}) = e^{-\lambda} \frac{\lambda^n}{n!}$, ce qui est la définition de la loi de Poisson de paramètre λ).

Le lecteur familier des énoncés usuels du théorème de Lanford dans (CERCIGNANI, ILLNER et PULVIRENTI, 1994) ou (GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et TEXIER, 2013) pourra être surpris du choix de l'ensemble grand-canonique dans cette étude. En effet, le processus collisionnel considéré ici, à savoir des collisions binaires entre sphères dures, laisse invariant le nombre de molécules. N'est-il donc pas artificiel de considérer le nombre de molécules comme aléatoire? En réalité, le fait de prescrire le nombre total de molécules introduit nécessairement une corrélation entre ces molécules qui ne provient ni de la dynamique, ni du choix de la condition initiale. Le formalisme grand-canonique permet précisément d'éviter cela (voir la remarque (6) dans la section 2.4.1 de (PULVIRENTI et SIMONELLA, 2017)).

1.3. Mesure(s) empirique(s) et corrélations

Pour tout $\epsilon > 0$, posons

$$\rho^\epsilon[N, Z_N] := \frac{1}{\mu_\epsilon} \sum_{j=1}^N \delta_{z_j}, \quad Z_N := (z_1, \dots, z_N) \in \Gamma_N^\epsilon.$$

Il s'agit d'une fonction sur l'espace grand-canonique Ω à valeurs dans l'espace des mesures de Radon sur $\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$. Elle vérifie $\rho^\epsilon[N, Z_N] \geq 0$ et $\|\rho^\epsilon[N, Z_N]\|_{VT} = N/\mu_\epsilon$. Pour tout $k \geq 1$, on pose de même

$$\rho_k^\epsilon[N, Z_N] := \frac{1}{\mu_\epsilon^k} \sum_{\substack{j:\{1,\dots,k\} \rightarrow \{1,\dots,N\} \\ \text{injective}}} \delta_{z_{j(1)}} \otimes \dots \otimes \delta_{z_{j(k)}} \geq 0,$$

fonction définie sur Ω à valeurs dans l'espace des mesures de Radon sur $(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^k$. Elle vérifie $\rho_k^\epsilon \geq 0$ ainsi que $\|\rho_k^\epsilon[N, Z_N]\|_{VT} = N(N-1)\dots(N-k+1)/\mu_\epsilon^k$. On notera enfin

$$(7) \quad \rho_t^\epsilon := \rho^\epsilon[N, S_t^{N,\epsilon} Z_N], \quad \rho_{k,t}^\epsilon := \rho_k^\epsilon[N, S_t^{N,\epsilon} Z_N].$$

A partir de là, on définit la suite des corrélations $F_k^\epsilon(t, \cdot)$ entre k molécules à l'instant t pour l'ensemble grand-canonique par la formule

$$(8) \quad \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^k} F_k^\epsilon(t, Z_k) h_k(Z_k) dZ_k := \mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_{k,t}^\epsilon, h_k \rangle), \quad k \geq 1,$$

pour toute fonction test $h_k \in C_b((\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^k)$ symétrique en ses k variables.

Ce formalisme diffère de celui de la « hiérarchie BBGKY » : voir (GOLSE, 2014). Posons

$$\mathbb{F}_{n:k}(t, Z_k) := \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^{n-k}} \mathbb{F}_n^{in}(S_{-t}^{n,\epsilon} Z_n) dz_{k+1} \dots dz_n.$$

Cette formule vaut pour $n > k \geq 0$; on convient par ailleurs que $\mathbb{F}_{n:n} = \mathbb{F}_n = \mathbb{F}_n^{in} \circ S_{-t}^{n,\epsilon}$ et que $\mathbb{F}_{n:k} = 0$ lorsque $k > n$.

Une remarque importante s'impose : la fonction de distribution à n corps initiale \mathbb{F}_n^{in} est évidemment symétrique en les variables z_1, \dots, z_n comme le montre la formule (6), et cette symétrie est propagée par la dynamique $S_t^{n,\epsilon}$, de sorte que $\mathbb{F}_n(t, \cdot)$ est également symétrique en les variables z_1, \dots, z_n . Du point de vue de la physique, cette symétrie traduit le fait que les molécules sont indistinguables.

Le point de vue de la hiérarchie BBGKY décrit dans (GOLSE, 2014) consistait à étudier $\mathbb{F}_{n:1}$ dans la limite où $n \rightarrow +\infty$ avec $\epsilon \rightarrow 0^+$ vérifiant la condition de Boltzmann–Grad $n\epsilon^2 = 1$. La traduction entre ce formalisme et celui de l'ensemble grand-canonique considéré ici découle du lemme ci-dessous.

LEMME 1.4. — Pour tout $\epsilon > 0$ et tout $t \geq 0$,

$$F_k^\epsilon(t, \cdot) = \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq k} \frac{\mu_\epsilon^{n-k}}{(n-k)!} \mathbb{F}_{n:k}(t, \cdot), \quad k \geq 1.$$

Démonstration. — En effet, pour toute fonction test $h_k \in C_b((\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^k)$ symétrique,

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_{k,t}^\epsilon, h_k \rangle) &= \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq k} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^{n-k}} \langle \rho_k^\epsilon[n, S_t^{n,\epsilon} Z_n], h_k \rangle \mathbb{F}_n^{in}(Z_n) dZ_n \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq k} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^{n-k}} \langle \rho_k^\epsilon[n, Z_n], h_k \rangle \mathbb{F}_n^{in}(S_{-t}^{n,\epsilon} Z_n) dZ_n \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq k} \frac{\mu_\epsilon^{n-k}}{n!} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^{n-k}} \sum_{\substack{j: \{1, \dots, k\} \rightarrow \{1, \dots, N\} \\ \text{injective}}} h_k(z_{j(1)}, \dots, z_{j(k)}) \mathbb{F}_n^{in}(S_{-t}^{n,\epsilon} Z_n) dZ_n \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq k} \frac{\mu_\epsilon^{n-k}}{n!} n(n-1) \dots (n-k+1) \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^{n-k}} h_k(z_1, \dots, z_k) \mathbb{F}_n^{in}(S_{-t}^{n,\epsilon} Z_n) dZ_n \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq k} \frac{\mu_\epsilon^{n-k}}{(n-k)!} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^{n-k}} h_k(z_1, \dots, z_k) \mathbb{F}_{n:k}(t, Z_n) dZ_n. \end{aligned}$$

La mesure de Lebesgue sur Γ_n^ϵ est invariante par $S_t^{n,\epsilon}$, d'où la seconde égalité. La quatrième égalité découle de la symétrie des fonctions h_k et $\mathbb{F}_n(t, \cdot)$. \square

1.4. Équation de Liouville et corrélations

La formule $\mathbb{F}_n(t, Z_n) = \mathbb{F}_n^{in}(S_{-t}^{\epsilon, n} Z_n)$ montre que \mathbb{F}_n est constante sur les courbes intégrales de (1)-(2)-(3), d'où l'on déduit l'équation de Liouville

$$(9) \quad \begin{aligned} \partial_t \mathbb{F}_n(t, Z_n) + \sum_{i=1}^n v_i \cdot \nabla_{x_i} \mathbb{F}_n(t, Z_n) &= 0, \quad Z_n \in \Gamma_n^\epsilon, \\ \mathbb{F}_n(t, Z_n) &= \mathbb{F}_n(t, \hat{Z}_n[i, j]) \quad \text{si } \text{dist}(x_i(t), x_j(t)) = \epsilon, \end{aligned}$$

où

$$\begin{aligned} \hat{Z}_n[i, j] &:= (x_1, v_1, \dots, x_i, v'_i, \dots, x_j, v'_j, \dots, x_n, v_n), \quad \text{lorsque } \text{dist}(x_i(t), x_j(t)) = \epsilon, \\ v'_i &:= v_i - ((v_i - v_j) \cdot n_{ji}) n_{ji}, \quad v'_j := v_j + ((v_i - v_j) \cdot n_{ji}) n_{ji}, \quad \text{où } n_{ji} := \frac{x_i - x_j}{\epsilon}. \end{aligned}$$

En particulier, la condition aux limites ajoutée à l'équation de Liouville découle de (2)-(3). Il sera commode de remplacer le problème aux limites ci-dessus pour l'équation de Liouville, posé sur le domaine Γ_n^ϵ , par une équation au sens des distributions sur $(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n$. Par définition $\mathbb{F}_n(t, Z_n) = 0$ dans $(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n \setminus \Gamma_n^\epsilon$, de sorte que

$$(10) \quad \begin{aligned} \partial_t \mathbb{F}_n(t, Z_n) + \sum_{i=1}^n v_i \cdot \nabla_{x_i} \mathbb{F}_n(t, Z_n) &= \sum_{1 \leq i < j \leq n} \mathbb{F}_n \Big|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon} (v_j - v_i) \cdot n_{ij} \delta_{\text{dist}(x_i, x_j) = \epsilon} \\ &= \sum_{1 \leq i < j \leq n} \mathbb{F}_n \Big|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon} ((v_j - v_i) \cdot n_{ij})_+ \delta_{\text{dist}(x_i, x_j) = \epsilon} \\ &\quad - \sum_{1 \leq i < j \leq n} \mathbb{F}_n \Big|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon} ((v_j - v_i) \cdot n_{ij})_- \delta_{\text{dist}(x_i, x_j) = \epsilon} \end{aligned}$$

au sens des distributions sur $(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n$. Pour tout réel r , on pose $r_+ = \max(r, 0)$ et $r_- = \max(-r, 0)$, tandis que la trace interne de \mathbb{F}_n sur $\partial \Gamma_n^\epsilon$ est notée

$$\mathbb{F}_n \Big|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon} := \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \mathbb{F}_n \Big|_{\partial \Gamma_n^{\epsilon+\eta}}.$$

Enfin $\delta_{\text{dist}(x_i, x_j) = \epsilon}$ désigne la distribution de simple couche de densité 1 portée par l'hypersurface de $(\mathbf{T}^3)^n$ d'équation $\text{dist}(x_i, x_j) = \epsilon$. (Pour la justification de (10), voir la formule (20) de (GOLSE, 2014), ainsi que la formule (II.3.1) de (SCHWARTZ, 1966)).

On utilise alors la condition aux limites de (9) pour exprimer $\mathbb{F}_n \Big|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon}$ aux endroits où $(v_j - v_i) \cdot n_{ij} > 0$ (précaution absolument essentielle, comme on le verra) :

$$(11) \quad \begin{aligned} &\partial_t \mathbb{F}_n(t, Z_n) + \sum_{i=1}^n v_i \cdot \nabla_{x_i} \mathbb{F}_n(t, Z_n) \\ &= \sum_{1 \leq i < j \leq n} \mathbb{F}_n(t, \hat{Z}_n[i, j]) \Big|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon} ((v_j - v_i) \cdot n_{ij})_+ \delta_{\text{dist}(x_i, x_j) = \epsilon} \\ &\quad - \sum_{1 \leq i < j \leq n} \mathbb{F}_n(t, Z_n) \Big|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon} ((v_j - v_i) \cdot n_{ij})_- \delta_{\text{dist}(x_i, x_j) = \epsilon}. \end{aligned}$$

En intégrant chaque membre de cette égalité par rapport aux variables z_2, \dots, z_n , on aboutit à

$$(12) \quad \partial_t \mathbb{F}_{n:1}(t, z_1) + v_1 \cdot \nabla_{x_1} \mathbb{F}_{n:1}(t, z_1) = (n-1) \epsilon^2 \mathcal{B}_\epsilon^{12}(\mathbb{F}_{n:2})(t, z_1)$$

où

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_\epsilon^{12}(\mathbb{F}_{n:2})(t, z_1) &= \iint_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} \mathbb{F}_{n:2}(t, x_1, v'_1, x_1 - \epsilon\omega, v'_2) ((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+ dv_2 d\omega \\ &\quad - \iint_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} \mathbb{F}_{n:2}(t, x_1, v_1, x_1 + \epsilon\omega, v_2) ((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+ dv_2 d\omega, \end{aligned}$$

où on a posé

$$v'_1 := v_1 - ((v_1 - v_2) \cdot \omega)\omega, \quad v'_2 := v_2 + ((v_1 - v_2) \cdot \omega)\omega.$$

On renvoie le lecteur à (GOLSE, 2014), tout particulièrement à l'argument permettant de passer de (10), c'est-à-dire de l'égalité (20) de (GOLSE, 2014), à (12), autrement dit à l'égalité (22) et à la formule (23) de (GOLSE, 2014).

Multiplions maintenant chaque membre de (12) par $\mu_\epsilon^{n-1}/(n-1)!$, et sommons les expressions ainsi obtenues pour $n \geq 1$. Comme $\epsilon^2 \mu_\epsilon = 1$, il vient

$$\begin{aligned} (\partial_t + v_1 \cdot \nabla_{x_1}) F_1^\epsilon(t, z_1) &= (\partial_t + v_1 \cdot \nabla_{x_1}) \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^{n-1}}{(n-1)!} \mathbb{F}_{n:1}(t, z_1) \\ (13) \quad &= \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 2} \frac{\mu_\epsilon^{n-2}}{(n-2)!} \mathcal{B}_\epsilon^{12}(\mathbb{F}_{n:2})(t, z_1) = \mathcal{B}_\epsilon^{12}(F_2^\epsilon)(t, z_1). \end{aligned}$$

1.5. L'hypothèse de chaos moléculaire et le théorème de Lanford

L'égalité (13) n'est pas vraiment une équation pour F_1^ϵ , puisqu'elle fait intervenir F_2^ϵ .

L'idée clé de Boltzmann lui permettant d'arriver à l'équation portant son nom est que deux molécules *sur le point d'entrer en collision* sont statistiquement indépendantes, hypothèse dite du « chaos moléculaire » (voir par exemple les sections 8 et 11 de (GRAD, 1958)). Évidemment, deux molécules *venant juste d'entrer en collision* ne peuvent pas être statistiquement indépendantes. Considérons alors l'intégrande du terme $\mathcal{B}_\epsilon^{12}(F_2^\epsilon)$, à savoir

$$(F_2^\epsilon(t, x_1, v'_1, x_1 - \epsilon\omega, v'_2) - F_2^\epsilon(t, x_1, v_1, x_1 + \epsilon\omega, v_2)) ((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+.$$

Dans le second terme de cette différence, on a

$$(v_1 - v_2) \cdot \omega = -\frac{1}{\epsilon}(v_1 - v_2) \cdot (x_1 - x_2) > 0,$$

de sorte que la molécule située en x_1 de vitesse v_1 s'approche de la molécule située en $x_2 = x_1 + \epsilon\omega$ et de vitesse v_2 (voir la figure 1.5). Comme ces deux molécules sont sur le point d'entrer en collision, l'hypothèse du chaos moléculaire entraîne que

$$F_2^\epsilon(t, x_1, v_1, x_1 + \epsilon\omega, v_2) \simeq F_1(t, x_1, v_1) F_1(t, x_1, v_2),$$

où

$$F_1(t, x_1, v_1) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} F_1^\epsilon(t, x_1, v_1).$$

De même, dans le premier terme de cette différence, on a

$$(v_1 - v_2) \cdot \omega = \frac{1}{\epsilon}(v_1 - v_2) \cdot (x_1 - x_2) = -\frac{1}{\epsilon}(v'_1 - v'_2) \cdot (x_1 - x_2) > 0,$$

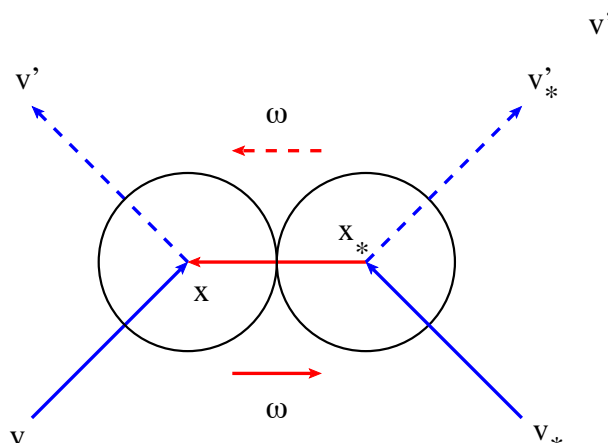


FIGURE 1. Collision binaire. Avant la collision $(v - v_*) \cdot (x - x_*) < 0$, après collision $(v' - v'_*) \cdot (x - x_*) = -(v - v_*) \cdot (x - x_*) > 0$. On pose $\omega = -\frac{x-x_*}{|x-x_*|}$ avant collision, de sorte que $x_* = x + \epsilon\omega$ et $(v - v_*) \cdot \omega > 0$, et $\omega = \frac{x-x_*}{|x-x_*|}$ après collision, de sorte que $x_* = x - \epsilon\omega$ et $(v - v_*) \cdot \omega > 0$.

de sorte que la molécule située en x_1 de vitesse v'_1 s'approche de la molécule située en $x_2 = x_1 - \epsilon\omega$ et de vitesse v'_2 (voir la figure 1.5). Ces deux molécules sont donc elles aussi sur le point d'entrer en collision, et l'hypothèse du chaos moléculaire entraîne que

$$F_2^\epsilon(t, x_1, v'_1, x_1 - \epsilon\omega, v'_2) \simeq F_1(t, x_1, v'_1)F_1(t, x_1, v'_2).$$

En passant formellement à la limite dans (13), et en tenant compte des implications de l'hypothèse du chaos moléculaire de Boltzmann mentionnées ci-dessus, on trouve que F_1 est solution de l'équation de Boltzmann

$$(14) \quad (\partial_t + v \cdot \nabla_x)F_1(t, z) = \mathcal{B}(F_1)(t, z),$$

où $\mathcal{B}(F_1)$ est l'intégrale de collision de Boltzmann, soit

$$(15) \quad \mathcal{B}(F_1)(t, z) := \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (F_1(t, x, v')F_1(t, x, v'_*) - F_1(t, x, v)F_1(t, x, v_*))((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv_* d\omega,$$

avec la notation

$$(16) \quad v' \equiv v'(v, v_*, \omega) := v - ((v - v_*) \cdot \omega)\omega, \quad v'_* \equiv v'_*(v, v_*, \omega) := v_* + ((v - v_*) \cdot \omega)\omega.$$

Le raisonnement ci-dessus montre tout l'intérêt d'avoir utilisé la condition aux limites de (9) dans la section précédente pour exprimer le terme $\mathbb{F}_n|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon}$ là où $(v_j - v_i) \cdot n_{ij} > 0$. Si l'on néglige cette étape, on aboutit à l'équation

$$(\partial_t + v_1 \cdot \nabla_{x_1})F_1^\epsilon(t, z_1) = \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} F_2^\epsilon(t, x_1, v_1, x_1 - \epsilon\omega, v_2)(v_1 - v_2) \cdot \omega dv_2 d\omega,$$

au lieu de (13). Si l'on suppose maintenant que

$$F_2^\epsilon(t, x_1, v_1, x_1 - \epsilon\omega, v_2) \simeq F_1(t, x_1, v_1)F_1(t, x_1, v_2)$$

dans l'intégrale au membre de droite *indépendamment du signe de* $(v_1 - v_2) \cdot \omega$, on trouve, en passant formellement à la limite dans l'équation ci-dessus, que

$$(\partial_t + v_1 \cdot \nabla_{x_1})F_1(t, z_1) = \int_{\mathbf{R}^3} F_1(t, x_1, v_1)F_1(t, x_1, v_2) \left(\int_{\mathbf{S}^2} (v_1 - v_2) \cdot \omega d\omega \right) dv_2 = 0.$$

Autrement dit, l'hypothèse de factorisation de $F_2^\epsilon(t, x_1, v_1, x_1 - \epsilon\omega, v_2)$ *indépendamment du signe de* $(v_1 - v_2) \cdot \omega$, et donc en particulier pour des molécules venant juste d'entrer en collision, par conséquent fortement corrélées, nous amènerait à la conclusion inintéressante — et expérimentalement fautive — que F_1 évolue suivant l'équation de transport libre (sans intégrale de collision).

Cette discussion montre la subtilité de l'hypothèse de Boltzmann, ainsi que la difficulté à la formaliser mathématiquement. La limite $F_1^\epsilon(t, z_1) \rightarrow F_1(t, z_1)$ lorsque $\epsilon \rightarrow 0^+$ doit avoir lieu dans une topologie permettant de déduire que

$$F_2^\epsilon(t, x_1, v_1, x_1 + \epsilon\omega, v_2)((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+ \rightarrow F_1(t, x_1, v_1)F_1(t, x_1, v_2)((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+,$$

mais pas que

$$F_2^\epsilon(t, x_1, v_1, x_1 - \epsilon\omega, v_2)((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+ \rightarrow F_1(t, x_1, v_1)F_1(t, x_1, v_2)((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+$$

lorsque $\epsilon \rightarrow 0^+$. Comme ces convergences ont lieu sur des ensembles de mesure nulle, la convergence p.p. pour la mesure de Lebesgue de $(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^2$ est insuffisante.

On renvoie le lecteur aux textes de GRAD (1949, 1958) et à l'appendice A1 du livre (SONE, 2007) pour une analyse plus détaillée de ces questions.

Passons maintenant à l'énoncé du théorème de Lanford, qui est la justification rigoureuse de l'équation de Boltzmann (14) à partir du système (1)-(2)-(3).

THÉORÈME 1.5 (Lanford). — *Soit $f^{in} \in C^1(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)$, densité de probabilité telle que*

$$(17) \quad f^{in}(x, v) + |\nabla_x f^{in}(x, v)| \leq C_0 e^{-\beta_0 |v|^2}, \quad x \in \mathbf{T}^3, v \in \mathbf{R}^3,$$

où $C_0, \beta_0 > 0$. *Considérons la famille des fonctions de corrélations $(F_k^\epsilon)_{k \geq 1, \epsilon > 0}$ définies par (8) pour l'ensemble grand-canonique où $\mu_\epsilon = \epsilon^{-2}$, selon la loi d'échelle de Boltzmann–Grad. Alors, il existe $T_0 = T[C_0, \beta_0] > 0$ tel que, lorsque $\epsilon \rightarrow 0^+$*

(1) $F_1^\epsilon(t, \cdot)$ *converge uniformément sur tout compact de $\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$ vers $f(t, \cdot)$ pour tout $t \in [0, T_0]$, où f est l'unique solution de l'équation de Boltzmann (14) sur $\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$ vérifiant la condition initiale*

$$(18) \quad f(0, x, v) = f^{in}(x, v), \quad x \in \mathbf{T}^3, v \in \mathbf{R}^3;$$

(2) *pour tous $k \geq 2$ et $t \in [0, T_0]$, la famille $F_k^\epsilon(t, Z_k)$ des fonctions de corrélation à k molécules converge pour presque tout $Z_k \in (\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^k$ vers*

$$f(t, \cdot)^{\otimes k}(Z_k) := \prod_{j=1}^k f(t, z_j).$$

Cet énoncé appelle une remarque importante : si l'on compare les points (1) et (2) du théorème de Lanford, on voit que la notion de convergence utilisée pour F_k^c avec $k \geq 2$ est plus faible que celle utilisée pour F_1^c . Ce point particulier avait été prévu par GRAD (1958) (voir section 11, p. 223, dernier paragraphe) bien avant la démonstration de Lanford.

On trouve notamment dans (GRAD, 1958) la phrase suivante « [...] it is possible to specify the exceptional set on which $F_2^c(t, z_1, z_2)$ does not converge to $F_1(t, z_1)F_1(t, z_2)$ rather precisely [...] » . Ce point particulier est étudié en détail par BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA (2018), et nous y renvoyons le lecteur intéressé par cette question.

1.6. Ce qu'on ne doit pas ignorer à propos de l'équation de Boltzmann

Bien que le but de cet exposé soit d'aller « au-delà de l'équation de Boltzmann », nous utiliserons à plusieurs reprises certaines propriétés mathématiques de base de cette équation, propriétés que nous allons rappeler ici.

L'équation de Boltzmann s'écrit en toute généralité

$$(19) \quad (\partial_t + v \cdot \nabla_x)f(t, x, v) + \mathbf{a}(t, x) \cdot \nabla_v f(t, x, v) = \mathcal{B}(f)(t, x, v), \quad (x, v) \in \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3,$$

où \mathbf{a} est un champ d'accélération provenant d'une force extérieure — comme la gravité par exemple — tandis que $\mathcal{B}(f)$ désigne l'intégrale des collisions de Boltzmann et décrit la variation en temps de la population de molécules de vitesse v due à des collisions avec des molécules de vitesses différentes. L'inconnue f est la « fonction de distribution » (en vitesse) des molécules, à savoir la densité par rapport à la mesure de Lebesgue sur l'espace des phases $\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$ du nombre de molécules situées au point x à l'instant t et animées de la vitesse v . Dans tout cet exposé, on négligera systématiquement l'effet de la force extérieure, de sorte que $\mathbf{a} = 0$, et que

$$(\partial_t + v \cdot \nabla_x)f(t, x, v) = \mathcal{B}(f)(t, x, v), \quad (x, v) \in \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3.$$

Nous aurons besoin des propriétés essentielles suivantes de l'intégrale des collisions de Boltzmann. Comme le montre la définition (15), cette intégrale des collisions n'agit que sur la dépendance en v de la fonction de distribution. Il suffit donc de l'étudier sur des fonctions constantes en (t, x) .

Formulation faible. Pour tout $\phi \in C(\mathbf{R}^3)$ à décroissance rapide, $\mathcal{B}(\phi) \in C(\mathbf{R}^3)$ est à décroissance rapide, et, pour toute fonction test $\psi \in C(\mathbf{R}^3)$ à croissance polynomiale à l'infini, on a les identités suivantes (dont la preuve sera esquissée plus loin, et où v' et

v'_* sont donnés en fonction de v, v_* et ω par (16))

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{R}^3} \mathcal{B}(\phi)(v)\psi(v)dv &= \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (\psi(v') - \psi(v))\phi(v)\phi(v_*)((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv dv_* d\omega \\ &= \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (\psi(v'_*) - \psi(v_*))\phi(v)\phi(v_*)((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv dv_* d\omega \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (\psi(v') + \psi(v'_*) - \psi(v) - \psi(v_*))\phi(v)\phi(v_*)((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv dv_* d\omega \\ &= \frac{1}{4} \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (\psi(v) + \psi(v_*) - \psi(v') - \psi(v'_*))(\phi(v')\phi(v'_*) - \phi(v)\phi(v_*)) \\ &\quad \times ((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv dv_* d\omega. \end{aligned}$$

Lois de conservation locales. Pour tout $\phi \in C(\mathbf{R}^3)$ à décroissance rapide,

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{R}^3} \mathcal{B}(\phi)(v)dv &= 0 \quad (\text{conservation locale de la masse}), \\ \int_{\mathbf{R}^3} \mathcal{B}(\phi)(v)\frac{1}{2}|v|^2 dv &= 0 \quad (\text{conservation locale de l'énergie}), \end{aligned}$$

ainsi que

$$\int_{\mathbf{R}^3} \mathcal{B}(\phi)(v)v dv = 0 \quad (\text{conservation locale de l'impulsion}).$$

Ces lois de conservation se déduisent de la formulation faible en observant que

$$\psi(v) = \alpha_0 + \sum_{i=1}^3 \alpha_i v_i + \alpha_4 |v|^2 \implies$$

$$\psi(v') + \psi(v'_*) - \psi(v) - \psi(v_*) = 0 \quad \text{pour tous } v, v_* \in \mathbf{R}^3 \text{ et } \omega \in \mathbf{S}^2,$$

où les vitesses v' et v'_* sont données en fonction de v, v_*, ω par les relations (16).

Évidemment, si $\phi \equiv \phi(t, x, v)$ est une solution de classe C^1 de l'équation de Boltzmann sur $]0, T[\times \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$ à décroissance rapide en v ainsi que ses dérivées premières, on déduit des formules ci-dessus que

$$\begin{aligned} \partial_t \int_{\mathbf{R}^3} \phi(t, x, v)dv + \nabla_x \cdot \int_{\mathbf{R}^3} v\phi(t, x, v)dv &= 0, \\ \partial_t \int_{\mathbf{R}^3} v_i \phi(t, x, v)dv + \nabla_x \cdot \int_{\mathbf{R}^3} v v_i \phi(t, x, v)dv &= 0, \\ \partial_t \int_{\mathbf{R}^3} \frac{1}{2}|v|^2 \phi(t, x, v)dv + \nabla_x \cdot \int_{\mathbf{R}^3} v \frac{1}{2}|v|^2 \phi(t, x, v)dv &= 0, \end{aligned}$$

qui sont bien des lois de conservation locales, puisque chacune se met sous la forme $\text{div}_{t,x} V(t, x) = 0$, où V est un champ de vecteurs sur $]0, T[\times \mathbf{T}^3$.

Théorème H de Boltzmann. Soit $\phi \in C(\mathbf{R}^3)$ à décroissance rapide telle que $\phi > 0$ et $\ln \phi$ soit à croissance polynomiale (par exemple $\phi(v) = e^{-P(|v|^2)}$ où P est une fonction polynomiale de coefficient dominant strictement positif). Alors

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{R}^3} \mathcal{B}(\phi)(v) \ln \phi(v)dv &= -\frac{1}{4} \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (\phi(v')\phi(v'_*) - \phi(v)\phi(v_*)) \ln \left(\frac{\phi(v')\phi(v'_*)}{\phi(v)\phi(v_*)} \right) \\ &\quad \times ((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv dv_* d\omega \leq 0, \end{aligned}$$

puisque \ln est une fonction croissante. D'autre part

$$\mathcal{B}(\phi) = 0 \iff \int_{\mathbf{R}^3} \mathcal{B}(\phi)(v) \ln \phi(v) dv = 0 \iff \phi \text{ est une maxwellienne,}$$

c'est-à-dire que ϕ est de la forme

$$(20) \quad \mathcal{M}_{\rho,u,\theta}(v) := \frac{\rho}{(2\pi\theta)^{3/2}} e^{-|v-u|^2/2\theta}.$$

De nouveau, si $\phi \equiv \phi(t, x, v) > 0$ est une solution de classe C^1 de l'équation de Boltzmann sur $[0, T[\times \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$ à décroissance rapide en v ainsi que ses dérivées premières, telle que $\ln \phi$ soit à croissance polynomiale en v , on en déduit que

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \phi(t, x, v) \ln \phi(t, x, v) dx dv \leq 0.$$

Ceci permet en particulier de majorer la quantité

$$\int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \phi(t, x, v) \ln \phi(t, x, v) dx dv$$

en fonction de sa donnée initiale. Cette propriété est évidemment l'une des clés pour obtenir des solutions globales de l'équation de Boltzmann sans restriction de taille sur les données initiales (DIPERNA et LIONS, 1989; GÉRARD, 1988).

Le seul point un peu difficile dans les énoncés ci-dessus est la caractérisation des maxwelliennes par l'équation fonctionnelle $\ln(\phi(v)\phi(v_*)) = \ln(\phi(v')\phi(v'_*))$: voir par exemple le Théorème 3.1.1 dans (CERCIGNANI, ILLNER et PULVIRENTI, 1994). Tous les autres énoncés se déduisent de la formulation faible, dont nous allons maintenant expliquer la preuve.

D'abord, ϕ étant continue à décroissance rapide et ψ étant à croissance polynomiale, la fonction

$$(v, v_*) \mapsto |\phi(v')| + |\phi(v'_*)|$$

est à décroissance rapide, tandis que la fonction

$$(v, v_*) \mapsto |\psi(v')| + |\psi(v'_*)|$$

est à croissance polynomiale pour tout $\omega \in \mathbf{S}^2$, sachant que les vitesses v', v'_* sont données en fonction de v, v_* et ω par (16).

Puis, pour tout $\omega \in \mathbf{S}^2$, l'application $(v, v_*) \mapsto (v', v'_*)$ est une isométrie linéaire involutive de $\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3$, et conserve donc la mesure de Lebesgue $dv dv_*$. Donc

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} \psi(v)\phi(v')\phi(v'_*)((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv dv_* d\omega \\ &= \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} \psi(v')\phi(v)\phi(v_*)(-(v - v_*) \cdot \omega)_+ dv dv_* d\omega \\ &= \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} \psi(v')\phi(v)\phi(v_*)((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv dv_* d\omega, \end{aligned}$$

où la première égalité utilise que $(v' - v'_*) \cdot \omega = -(v - v_*) \cdot \omega$, tandis que la seconde est basée sur le fait que le changement de variables $\omega \mapsto -\omega$ laisse v' et v'_* invariants. Ceci démontre la première égalité de la formulation faible. La deuxième découle du fait

que, pour tout $\omega \in \mathbf{S}^2$ fixé, la symétrie $v \mapsto v_*$ échange v' et v'_* . Les deux dernières égalités de la formulation faible en découlent aussitôt. On se reportera à la section 3.1 de (CERCIGNANI, ILLNER et PULVIRENTI, 1994) pour un traitement plus détaillé de ces propriétés.

1.7. Le théorème de Lanford comme loi des grands nombres

Après cette digression sur les propriétés mathématiques de l'équation de Boltzmann, revenons au théorème de Lanford.

Le fait que la fonction de corrélation à deux molécules F_2^ϵ se factorise dans la limite de Boltzmann–Grad, ce qui est le point (2) du théorème de Lanford, donne une information sur la famille ρ_t^ϵ des mesures empiriques définies en (7).

COROLLAIRE 1.6. — *Soit $h \in C_c(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)$. Sous les hypothèses du théorème de Lanford, pour tout $\eta > 0$*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \mathbb{P}_\epsilon \left(\left\{ \left| \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle - \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z) f(t, z) dz \right| > \eta \right\} \right) = 0.$$

Démonstration. — L'inégalité de Bienaymé–Tchebychev dit que

$$\begin{aligned} & \mathbb{P}_\epsilon \left(\left\{ \left| \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle - \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z) f(t, z) dz \right| > \eta \right\} \right) \\ & \leq \frac{1}{\eta^2} \mathbb{E}_\epsilon \left(\left| \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle - \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z) f(t, z) dz \right|^2 \right). \end{aligned}$$

Or

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\epsilon \left(\left| \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle - \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z) f(t, z) dz \right|^2 \right) &= \mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, h \rangle^2) + \left(\int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z) f(t, z) dz \right)^2 \\ &\quad - 2 \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z) F_1^\epsilon(t, z) dz \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z) f(t, z) dz, \end{aligned}$$

et un calcul simple montre que

$$\langle \rho_t^\epsilon, h \rangle^2 = \langle \rho_t^\epsilon \otimes \rho_t^\epsilon, h \otimes h \rangle = \frac{1}{\mu_\epsilon} \langle \rho_t^\epsilon, h^2 \rangle + \langle \rho_{2,t}^\epsilon, h \otimes h \rangle,$$

de sorte que

$$\mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, h \rangle^2) = \frac{1}{\mu_\epsilon} \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z)^2 F_1^\epsilon(t, z) dz + \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^2} h(z_1) h(z_2) F_2^\epsilon(t, Z_2) dZ_2.$$

Comme h est à support compact, le point (1) du théorème de Lanford montre que

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\mu_\epsilon} \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z)^2 F_1^\epsilon(t, z) dz - 2 \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z) F_1^\epsilon(t, z) dz \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z) f(t, z) dz \\ & \rightarrow -2 \left(\int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z) f(t, z) dz \right)^2, \end{aligned}$$

tandis que le point (2) du théorème de Lanford et une borne sur F_2^ϵ sur laquelle on reviendra plus tard (voir la Proposition 2.4 et le paragraphe qui la suit) montrent que

$$\int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^2} h(z_1)h(z_2)F_2^\epsilon(t, Z_2)dZ_2 \rightarrow \left(\int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z)f(t, z)dz \right)^2$$

lorsque $\epsilon \rightarrow 0^+$, d'où le résultat annoncé. \square

Rappelons la loi (faible et forte) des grands nombres dans l'énoncé suivant.

THÉORÈME 1.7 (Loi des grands nombres). — *Soit $(Y_n)_{n \geq 1}$, suite de variables aléatoires indépendantes et identiquement distribuées, telles que $\mathbb{E}(|Y_1|) < +\infty$. Alors*

$$\frac{1}{n}(Y_1 + \dots + Y_n) \rightarrow \mathbb{E}(Y_1) \quad \text{en probabilité et presque sûrement lorsque } n \rightarrow +\infty.$$

Soit $\mathcal{Y} := (\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^{\mathbf{N}^*}$ muni de la mesure de probabilité borélienne définie par

$$\text{Prob}(\{\mathbf{z} \in \mathcal{Y} \text{ t.q. } (z_1, \dots, z_n) \in A_1 \times \dots \times A_n\}) = \prod_{i=1}^n \int_{A_i} w(z)dz,$$

où w est une densité de probabilité borélienne sur $\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$. Posons $Y_n(\mathbf{z}) := h(z_n)$; on vérifie sans peine que les variables aléatoires Y_n sont indépendantes et de même distribution, puisque

$$\text{Prob}(\{\mathbf{z} \in \mathcal{Y} \text{ t.q. } Y_n(\mathbf{z}) > y\}) = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \mathbf{1}_{h(z) > y} w(z)dz.$$

Enfin $\mathbb{E}(|Y_1|) \leq \|h\|_{L^\infty(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)} < +\infty$. D'après la loi faible des grands nombres

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \text{Prob} \left(\left\{ \mathbf{z} \in \mathcal{Y} \text{ t.q. } \left| \left\langle \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \delta_{z_i}, h \right\rangle - \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} h(z)w(z)dz \right| > \eta \right\} \right) = 0.$$

Cet exemple évoque évidemment la situation décrite dans le Corollaire 1.6. Pour autant, il s'agit une analogie plutôt que d'une véritable application de la loi faible des grands nombres telle qu'énoncée dans le Théorème 1.7. En effet

(a) les positions initiales des N particules ne peuvent en aucun cas être considérées comme indépendantes pour $\epsilon > 0$ à cause du facteur d'exclusion $\prod_{1 \leq i < j \leq N} \mathbf{1}_{\text{dist}(x_i, x_j) > \epsilon}$ dans

$$\mathbb{F}_N^{\text{in}}(Z_N) := \prod_{1 \leq i < j \leq N} \mathbf{1}_{\text{dist}(x_i, x_j) > \epsilon} (f^{\text{in}})^{\otimes N}(Z_N);$$

(b) au fur et à mesure de l'évolution du gaz, le nombre de collisions binaires entre molécules augmente, de sorte que les positions et les vitesses de ces N molécules deviennent « de moins en moins indépendantes ».

Néanmoins, il est utile de penser au théorème de Lanford comme à une sorte de loi des grands nombres appliquée à la suite de variables aléatoires $(h(z_n(t)))_{n \geq 1}$, où $z_n(t) = (x_n(t), v_n(t))$ est le couple position-vitesse de la n -ième molécule à l'instant t .

2. CUMULANTS ET ÉQUATION DE HAMILTON–JACOBI

Pour aller plus loin, deux voies se présentent :

- (1) étendre l'intervalle de temps $[0, T[C_0, \beta_0]]$ sur lequel le théorème de Lanford permet de déduire l'équation de Boltzmann (14) de la dynamique moléculaire (1)-(2)-(3) ;
- (2) puisque le théorème de Lanford peut s'interpréter comme une loi des grands nombres, transplanter dans le cadre de la limite de Boltzmann–Grad certains des théorèmes limites de la théorie des probabilités précisant la loi des grands nombres.

La démarche (1) présenterait un intérêt considérable. On sait que $T[C_0, \beta_0]$ est de l'ordre d'une fraction (1/5 pour être précis) du laps de temps moyen entre deux collisions successives subies par une même molécule prise au hasard dans le gaz : voir (LANFORD, 1976) p. 117, Remarque 3 p. 132. Comme expliqué dans (GOLSE, 2014) à la fin de la section 4.1, le temps de validité du théorème de Lanford a été étendu à $+\infty$ par ILLNER et PULVIRENTI (1989) dans le cas d'un domaine spatial \mathbf{R}^3 au lieu de \mathbf{T}^3 , et pour des données initiales correspondant à un degré de raréfaction du gaz tel que le libre parcours moyen est très grand, et augmente même au cours de l'évolution grâce à l'effet de dispersion dû à l'opérateur de transport libre $\partial_t + v \cdot \nabla_x$. À ce jour, l'extension du temps de validité du théorème de Lanford pour une classe assez générale de données initiales, même au temps d'existence d'une solution classique maximale de l'équation de Boltzmann, demeure un problème ouvert, peut-être impossible à résoudre avec les méthodes de démonstrations employées jusqu'ici.

C'est pourquoi une partie importante des travaux de Bodineau, Gallagher, Saint-Raymond et Simonella adoptent la démarche (2). On verra toutefois que cela leur permet d'apporter quelques réponses partielles — mais d'un grand intérêt — au problème (1).

2.1. Grandes déviations et théorème central limite

Revenons au cadre idéal du Théorème 1.7. La loi des grands nombres nous dit que la moyenne « empirique » des variables aléatoires Y_1, \dots, Y_n tend vers leur espérance mathématique commune $\mathbb{E}(Y_1)$. Une question naturelle consiste donc à étudier les fluctuations de la moyenne empirique autour de sa limite, c'est-à-dire

$$\sqrt{n} \left(\frac{Y_1 + \dots + Y_n}{n} - \mathbb{E}(Y_1) \right) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n (Y_i - \mathbb{E}(Y_i)).$$

Le choix de dilater les fluctuations par le facteur \sqrt{n} est justifié par le théorème central limite, rappelé ci-dessous.

THÉORÈME 2.1 (Théorème central limite). — *Soit $(Y_n)_{n \geq 1}$, suite de variables aléatoires réelles indépendantes et identiquement distribuées, telles que $\mathbb{E}(Y_1^2) < +\infty$. Alors*

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{i=1}^n (Y_i - \mathbb{E}(Y_i)) \rightarrow \mathcal{N}(0, \sigma^2) \quad \text{en loi lorsque } n \rightarrow +\infty,$$

où $\mathcal{N}(0, \sigma^2)$ est la loi normale centrée de variance $\sigma^2 := \mathbb{E}(Y_1^2) - \mathbb{E}(Y_1)^2$, de densité gaussienne $e^{-y^2/2\sigma^2}/\sigma\sqrt{2\pi}$ par rapport à la mesure de Lebesgue sur \mathbf{R} .

(Voir par exemple le chapitre IV, section 4.3 de (MALLIAVIN, 1995), où ce résultat porte le nom de « Théorème de Laplace »).

Comme on l'a dit plus haut, le problème de la limite de Boltzmann–Grad ne peut pas se réduire à l'étude d'une suite de variables aléatoires indépendantes. Toutefois, le théorème central limite suggère d'étudier les fluctuations de la mesure empirique autour de la fonction F_1^ϵ , dont le théorème de Lanford montre qu'elle converge vers la solution de l'équation de Boltzmann. Spécifiquement, on considèrera

$$(21) \quad \zeta_t^\epsilon := \sqrt{\mu_\epsilon}(\rho_t^\epsilon - F_1^\epsilon(t, \cdot)), \quad t \geq 0, \quad \epsilon > 0,$$

que l'on peut réécrire sous la forme

$$(22) \quad \langle \zeta_t^\epsilon, h \rangle := \sqrt{\mu_\epsilon}(\langle \rho_t^\epsilon, h \rangle - \mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, h \rangle)), \quad t \geq 0, \quad \epsilon > 0,$$

pour toute fonction $h \in C_b(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)$. D'une certaine manière, la fluctuation ζ_t^ϵ décrit une correction d'ordre supérieur $1/\sqrt{\mu_\epsilon} = \epsilon$ à la limite f décrite par le théorème de Lanford, laquelle évolue suivant l'équation de Boltzmann.

Revenons encore au cadre du Théorème 1.7. Comme le théorème central limite porte sur la convergence en loi des fluctuations de la moyenne empirique des variables aléatoires Y_1, \dots, Y_n autour de $\mathbb{E}(Y_1)$, on va étudier W_n , la loi de cette mesure empirique $\frac{1}{n}(Y_1 + \dots + Y_n)$. Notons w la loi commune aux variables aléatoires Y_i pour $i \geq 1$. L'indépendance des Y_i entraîne que W_n est la mesure image du produit de convolution à n termes $w \star \dots \star w$ par l'homothétie de rapport $1/n$ (voir par exemple le Corollaire 4.2.2 de (MALLIAVIN, 1995)).

THÉORÈME 2.2 (Théorème de Cramér). — *Soit $(Y_n)_{n \geq 1}$ une suite de variables aléatoires réelles indépendantes et identiquement distribuées de loi w , telles que, pour tout $\tau \in \mathbf{R}$, l'on ait $\mathbb{E}(\exp(\tau Y_1)) < +\infty$. Pour tout entier $n \geq 1$, notons W_n la loi de la moyenne empirique $\frac{1}{n}(Y_1 + \dots + Y_n)$. Alors, pour tout ouvert \mathcal{O} et tout fermé \mathcal{F} de \mathbf{R}*

$$\overline{\lim}_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \ln W_n(\mathcal{F}) \leq - \inf_{y \in \mathcal{F}} K(y) \quad \text{et} \quad \underline{\lim}_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \ln W_n(\mathcal{O}) \geq - \inf_{y \in \mathcal{O}} K(y),$$

où K est la transformée de Legendre du logarithme de la transformée de Laplace de w , à savoir

$$K(\theta) := \sup_{\tau \in \mathbf{R}} (\theta\tau - \ln \mathbb{E}(\exp(\tau Y_1))) = \sup_{\tau \in \mathbf{R}} \left(\theta\tau - \ln \int_{\mathbf{R}} e^{\tau y} w(dy) \right).$$

Le théorème de Cramér est l'un des énoncés fondamentaux de la théorie des « grandes déviations » (voir par exemple (VARADHAN, 1984) pour plus de détails, ainsi que pour une preuve de ce théorème). Soit $\bar{Y} := \mathbb{E}(Y_1)$; l'inégalité de Jensen montre que

$$\ln \mathbb{E}(\exp(\tau Y_1)) \geq \tau \bar{Y} \quad \text{pour tout } \tau \in \mathbf{R},$$

de sorte que $K(\bar{Y}) \leq 0$. D'autre part la fonction $\tau \mapsto \theta\tau - \ln \mathbb{E}(\exp(\tau Y_1))$ s'annule pour $\tau = 0$, de sorte que $K(\theta) \geq 0$ pour tout $\theta \in \mathbf{R}$ par définition, si bien que

$$K(\bar{Y}) = 0 = \min_{\theta \in \mathbf{R}} K(\theta).$$

Comme la fonction K est convexe par construction, elle décroît sur $] -\infty, \bar{Y}]$ et croît sur $[\bar{Y}, +\infty[$. Ainsi

$$\begin{aligned} a > \bar{Y} &\implies \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \ln W_n([a, +\infty[) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \ln W_n([a, +\infty[) = -K(a), \\ a < \bar{Y} &\implies \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \ln W_n(]-\infty, a]) = \lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{1}{n} \ln W_n(]-\infty, a]) = -K(a). \end{aligned}$$

Autrement dit, la probabilité que la moyenne empirique s'écarte de \bar{Y} d'une distance $\eta > 0$ décroît exponentiellement lorsque $n \rightarrow +\infty$ dès que $K(a + \eta) + K(a - \eta) > 0$.

Le théorème de Cramér apporte donc une information quant à la précision de l'approximation de la moyenne empirique par l'espérance dans la loi des grands nombres.

Bien que le problème de la limite de Boltzmann–Grad ne puisse pas se réduire à l'étude d'une suite de variables aléatoires indépendantes comme expliqué plus haut, le théorème de Cramér suggère donc cependant de considérer la quantité

$$(23) \quad \mathcal{K}_\epsilon(t, h) := \frac{1}{\mu_\epsilon} \ln \mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle)), \quad h \in C_b(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3), \quad t \geq 0.$$

2.2. Cumulants

La famille des cumulants d'ordre k est définie à partir de la famille des fonctions de corrélations F_k^ϵ comme suit :

$$(24) \quad f_k^\epsilon := \mu_\epsilon^{k-1} \sum_{j=1}^k \sum_{\sigma \in \mathcal{P}_k^j} (-1)^{j-1} (j-1)! F_\sigma^\epsilon,$$

où \mathcal{P}_k^j désigne l'ensemble des partitions $\sigma := \{\sigma_1, \dots, \sigma_j\}$ de $\{1, \dots, k\}$ en j sous-ensembles, et où

$$F_\sigma^\epsilon(t, Z_k) := \prod_{i=1}^j F_{\sigma_i}^\epsilon(t, Z_{\sigma_i}) \quad \text{avec} \quad F_{\sigma_i}^\epsilon(t, Z_{\sigma_i}) := F_{|\sigma_i|}^\epsilon(t, z_{l_1}, \dots, z_{l_{|\sigma_i|}}),$$

les indices $l_1, \dots, l_{|\sigma_i|}$ étant définis par l'égalité $\sigma_i = \{l_1, \dots, l_{|\sigma_i|}\}$. On vérifie que

$$f_1^\epsilon = F_1^\epsilon, \quad f_2^\epsilon(t, \cdot) = \mu_\epsilon(F_2^\epsilon(t, \cdot) - F_1^\epsilon(t, \cdot) \otimes F_1^\epsilon(t, \cdot))$$

puis que

$$\begin{aligned} f_3^\epsilon(t, \cdot) &= \mu_\epsilon^2(F_3^\epsilon(t, \cdot) - F_{\{1,2\}}^\epsilon(t, \cdot)F_{\{3\}}^\epsilon(t, \cdot) - F_{\{2,3\}}^\epsilon(t, \cdot)F_{\{1\}}^\epsilon(t, \cdot) \\ &\quad - F_{\{1,3\}}^\epsilon(t, \cdot)F_{\{2\}}^\epsilon(t, \cdot) + 2F_1^\epsilon(t, \cdot) \otimes F_1^\epsilon(t, \cdot) \otimes F_1^\epsilon(t, \cdot)). \end{aligned}$$

Le second cumulant f_2^ϵ est évidemment crucial pour la limite de Boltzmann–Grad, puisque l'hypothèse du chaos moléculaire de Boltzmann, qui est la clé du raisonnement

permettant de déduire l'équation de Boltzmann comme approximation de l'identité (13) reliant F_1^ϵ à F_2^ϵ , s'écrit simplement

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\mu_\epsilon} f_2^\epsilon(t, x, v_1, x + \epsilon\omega, v_2) = 0 \quad \text{lorsque } |\omega| = 1 \text{ et } (v_2 - v_1) \cdot \omega < 0.$$

Un travail important de PULVIRENTI et SIMONELLA (2017) montre d'ailleurs comment des estimations sur les cumulants permettent de quantifier l'erreur correspondant à l'hypothèse de chaos moléculaire, et utilise ces estimations pour préciser la limite de Boltzmann–Grad (voir les Théorèmes 2.4 et 2.5 de (PULVIRENTI et SIMONELLA, 2017)).

Dans ce qui va suivre, la notion de cumulant va être utilisée de manière différente. Le lemme ci-dessous permet d'abord de montrer que la notion de cumulant est liée à la fonctionnelle \mathcal{K}^ϵ dont l'étude est suggérée par le théorème de Cramér.

LEMME 2.3. — *Pour tout $\epsilon > 0$, tout $t \geq 0$ et tout $h \in C_b(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)$, on a*

$$\mathcal{K}^\epsilon(t, h) = \sum_{k \geq 1} \frac{1}{k!} \langle f_k^\epsilon(t, \cdot), (e^h - 1)^{\otimes k} \rangle.$$

Démonstration. — D'abord

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle)) - 1 &= \sum_{m \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^m}{m!} \mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, h \rangle^m) \\ &= \sum_{m \geq 1} \frac{1}{m!} \mathbb{E}_\epsilon \left(\sum_{j_1, \dots, j_m=1}^N h(z_{j_1}(t)) \dots h(z_{j_m}(t)) \right) \\ &= \sum_{m \geq 1} \frac{1}{m!} \sum_{n=1}^m \mu_\epsilon^n \sum_{\sigma \in \mathcal{P}_m^n} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n} \prod_{j=1}^n h(z_j)^{|\sigma_j|} F_n^\epsilon(t, Z_n) dZ_n. \end{aligned}$$

Or le nombre de partitions de $\{1, \dots, m\}$ en n ensembles à ν_1, \dots, ν_n éléments vaut

$$\frac{1}{n!} \binom{m}{n_1} \binom{m - \nu_1}{\nu_2} \dots \binom{m - \nu_1 - \dots - \nu_{p-2}}{\nu_{p-1}} = \frac{1}{n!} \frac{m!}{\nu_1! \dots \nu_n!},$$

de sorte que

$$\sum_{m \geq n} \frac{1}{m!} \sum_{\sigma \in \mathcal{P}_m^n} \prod_{j=1}^n h(z_j)^{|\sigma_j|} = \frac{1}{n!} \prod_{j=1}^n \sum_{\nu_j \geq 1} \frac{h(z_j)^{\nu_j}}{\nu_j!} = \frac{1}{n!} \prod_{j=1}^n (e^{h(z_j)} - 1).$$

En échangeant l'ordre des sommations en m et en n , on trouve donc que

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle)) - 1 &= \sum_{n \geq 1} \mu_\epsilon^n \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n} \sum_{m \geq n} \frac{1}{m!} \sum_{\sigma \in \mathcal{P}_m^n} \prod_{j=1}^n h(z_j)^{|\sigma_j|} F_n^\epsilon(t, Z_n) dZ_n \\ &= \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \langle F_n^\epsilon(t, \cdot), (e^h - 1)^{\otimes n} \rangle. \end{aligned}$$

Puis

$$\begin{aligned} \ln \mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle)) &= \sum_{p \geq 1} \frac{(-1)^{p-1}}{p} \left(\sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \langle F_n^\epsilon(t, \cdot), (e^h - 1)^{\otimes n} \rangle \right)^p \\ &= \sum_{p \geq 1} \frac{(-1)^{p-1}}{p} \sum_{n_1, \dots, n_p \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^{n_1 + \dots + n_p}}{n_1! \dots n_p!} \prod_{k=1}^p \langle F_{n_k}^\epsilon, (e^h - 1)^{\otimes n_k} \rangle. \end{aligned}$$

Grâce au dénombrement des partitions à p éléments de $\{1, \dots, n\}$ rappelé ci-dessus

$$\begin{aligned} \ln \mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle)) &= \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \sum_{p=1}^n \frac{(-1)^{p-1}}{p} p! \sum_{\sigma \in \mathcal{P}_n^p} \prod_{k=1}^p \langle F_{|\sigma_k|}^\epsilon, (e^h - 1)^{\otimes |\sigma_k|} \rangle \\ &= \mu_\epsilon \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \langle f_n^\epsilon, (e^h - 1)^{\otimes n} \rangle, \end{aligned}$$

d'où le résultat annoncé. \square

Le Lemme 2.3 explique donc pourquoi la fonctionnelle \mathcal{K}^ϵ est appelée « fonction génératrice des cumulants ».

2.3. Equation de Hamilton–Jacobi fonctionnelle : approche formelle

L'un des résultats principaux de BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA (2022d) est que, dans la limite de Boltzmann–Grad, c'est-à-dire lorsque $\epsilon \rightarrow 0^+$, la fonction génératrice des cumulants est solution d'une équation de Hamilton–Jacobi « fonctionnelle ». Le but de cette section est de présenter un calcul purement formel, inspiré de la section 3.3 de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022a) aboutissant à cette équation. Les énoncés rigoureux feront l'objet de la section suivante.

2.3.1. Dérivées fonctionnelles de $\mathcal{K}^\epsilon(t, \cdot)$ d'ordre un et deux. — Soient trois fonctions test $h, \phi, \psi \in C_b(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)$. On commence par calculer

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h), \phi \right\rangle &= \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{\mathcal{K}^\epsilon(t, h + \eta\phi) - \mathcal{K}^\epsilon(t, h)}{\eta} \\ &= \frac{1}{\mu_\epsilon \mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))} \lim_{\eta \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left(\frac{\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h + \eta\phi \rangle) - \exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle)}{\eta} \right) \\ &= \frac{\mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, \phi \rangle \exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))}{\mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))}. \end{aligned}$$

Passons maintenant au calcul de la dérivée seconde :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2 \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h^2}(t, h) \cdot (\phi, \psi) &= \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\eta} \left(\left\langle \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h + \eta\phi), \psi \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h), \psi \right\rangle \right) \\
&= \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\eta} \left(\frac{\mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, \psi \rangle \exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h + \eta\phi \rangle))}{\mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h + \eta\phi \rangle))} - \frac{\mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, \psi \rangle \exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))}{\mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))} \right) \\
&= \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\eta} \left(\frac{\mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, \psi \rangle \exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h + \eta\phi \rangle)) - \mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, \psi \rangle \exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))}{\mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h + \eta\phi \rangle))} \right) \\
&+ \mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, \psi \rangle \exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle)) \lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\eta} \left(\frac{1}{\mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h + \eta\phi \rangle))} - \frac{1}{\mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))} \right) \\
&= \mu_\epsilon \frac{\mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, \phi \rangle \langle \rho_t^\epsilon, \psi \rangle \exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))}{\mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))} \\
&\quad - \mu_\epsilon \frac{\mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, \psi \rangle \exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle)) \mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, \phi \rangle \exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))}{\mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))^2},
\end{aligned}$$

ce que l'on peut réécrire sous la forme

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\mu_\epsilon} \frac{\partial^2 \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h^2}(t, h) \cdot (\phi, \psi) &= \frac{\mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, \phi \rangle \langle \rho_t^\epsilon, \psi \rangle \exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))}{\mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))} \\
&\quad - \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h), \phi \right\rangle \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h), \psi \right\rangle,
\end{aligned}$$

ou encore, de manière plus condensée,

$$\frac{1}{\mu_\epsilon} \frac{\partial^2 \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h^2}(t, h) + \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h) \otimes \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h) = \frac{\mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle) \langle \rho_t^\epsilon \otimes \rho_t^\epsilon, \cdot \rangle)}{\mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle))}.$$

2.3.2. *Évolution de $\mathcal{K}^\epsilon(t, \cdot)$.* — Compte-tenu de la définition (23) de \mathcal{K}^ϵ (qui est un logarithme), il sera commode de calculer

$$\begin{aligned}
\exp(\mu_\epsilon \mathcal{K}^\epsilon(t, h)) \mu_\epsilon \partial_t \mathcal{K}^\epsilon(t, h) &= \partial_t \exp(\mu_\epsilon \mathcal{K}^\epsilon(t, h)) = \partial_t \mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle)) \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \partial_t \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n} \exp\left(\sum_{i=1}^n h(z_i(t))\right) \mathbb{F}_n^{in}(Z_n) dZ_n \\
&= \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n} \exp\left(\sum_{i=1}^n h(z_i)\right) \partial_t \mathbb{F}_n(t, Z_n) dZ_n.
\end{aligned}$$

On supposera d'autre part que la fonction test h est suffisamment régulière — par exemple, on pourra évidemment se restreindre au cas où $h \in C_c^\infty(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)$, mais on verra plus loin qu'il n'est pas nécessaire que h soit indéfiniment différentiable.

On exprime alors $\partial_t \mathbb{F}_n(t, \cdot)$ au moyen de l'équation de Liouville écrite au sens des distributions sous la forme (11) :

$$\begin{aligned} \partial_t \mathbb{F}_n(t, Z_n) &= - \sum_{i=1}^n v_i \cdot \nabla_{x_i} \mathbb{F}_n(t, Z_n) \\ &+ \sum_{1 \leq i < j \leq n} \mathbb{F}_n(t, \hat{Z}_n[i, j]) \Big|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon} ((v_j - v_i) \cdot n_{ij})_+ \delta_{\text{dist}(x_i, x_j) = \epsilon} \\ &\quad - \sum_{1 \leq i < j \leq n} \mathbb{F}_n(t, Z_n) \Big|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon} ((v_j - v_i) \cdot n_{ij})_- \delta_{\text{dist}(x_i, x_j) = \epsilon}. \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} \exp(\mu_\epsilon \mathcal{K}^\epsilon(t, h)) \mu_\epsilon \partial_t \mathcal{K}^\epsilon(t, h) &= - \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \left\langle \sum_{i=1}^n v_i \cdot \nabla_{x_i} \mathbb{F}_n(t, \cdot), \exp \left(\sum_{i=1}^n h(z_i) \right) \right\rangle \\ &+ \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \left\langle \sum_{1 \leq j < k \leq n} \mathbb{F}_n(t, \hat{Z}_n[j, k]) \Big|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon} ((v_k - v_j) \cdot n_{jk})_+ \delta_{\text{dist}(x_j, x_k) = \epsilon}, e^{\sum_{i=1}^n h(z_i)} \right\rangle \\ &\quad - \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \left\langle \sum_{1 \leq j < k \leq n} \mathbb{F}_n(t, \cdot) \Big|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon} ((v_k - v_j) \cdot n_{jk})_- \delta_{\text{dist}(x_j, x_k) = \epsilon}, e^{\sum_{i=1}^n h(z_i)} \right\rangle \\ &=: T_1 + T_2 - T_3. \end{aligned}$$

Le terme T_1 se réécrit comme suit :

$$\begin{aligned} T_1 &= \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \left\langle \mathbb{F}_n(t, \cdot), \sum_{i=1}^n v_i \cdot \nabla_{x_i} \exp \left(\sum_{i=1}^n h(z_i) \right) \right\rangle \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \left\langle \mathbb{F}_n(t, \cdot), \exp \left(\sum_{i=1}^n h(z_i) \right) \sum_{i=1}^n v_i \cdot \nabla_{x_i} h(z_i) \right\rangle \\ &= \mathbb{E}_\epsilon(\exp(\langle \mu_\epsilon \rho_t^\epsilon, h \rangle) \langle \mu_\epsilon \rho_t^\epsilon, v \cdot \nabla_x h \rangle) \\ &= \mathbb{E}_\epsilon(\exp(\mu_\epsilon \langle \rho_t^\epsilon, h \rangle)) \mu_\epsilon \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h), v \cdot \nabla_x h \right\rangle \\ &= \exp(\mu_\epsilon \mathcal{K}^\epsilon(t, h)) \mu_\epsilon \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h), v \cdot \nabla_x h \right\rangle. \end{aligned}$$

Passons au terme T_3 :

$$\begin{aligned} T_3 &= \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \left\langle \sum_{1 \leq j < k \leq n} \mathbb{F}_n(t, \cdot) \Big|_{\partial^+ \Gamma_n^\epsilon} ((v_k - v_j) \cdot n_{jk})_- \delta_{\text{dist}(x_j, x_k) = \epsilon}, e^{\sum_{i=1}^n h(z_i)} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \mu_\epsilon^2 \mathbb{E}_\epsilon(\exp(\langle \mu_\epsilon \rho_t^\epsilon, h \rangle) \langle \rho_t^\epsilon \otimes \rho_t^\epsilon, ((v - v_*) \cdot \frac{x - x_*}{\epsilon})_+ \delta_{\text{dist}(x, x_*) = \epsilon + 0} \rangle). \end{aligned}$$

Quant au terme T_2 , il vient :

$$\begin{aligned} T_2 &= \frac{1}{\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \left\langle \sum_{1 \leq j < k \leq n} \mathbb{F}_n(t, \hat{Z}_n[j, k]) \Big|_{\partial + \Gamma_n^\epsilon} \left((v_k - v_j) \cdot n_{jk} \right)_+ \delta_{\text{dist}(x_j, x_k) = \epsilon}, e^{\sum_{i=1}^n h(z_i)} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2\mathcal{Z}_\epsilon} \sum_{n \geq 1} \frac{\mu_\epsilon^n}{n!} \left\langle \sum_{j, k=1}^n \mathbb{F}_n(t, \cdot) \left((v'_k - v'_j) \cdot n_{jk} \right)_+ \delta_{\text{dist}(x_j, x_k) = \epsilon + 0}, e^{\mathbf{D}h(z_j, z_k, n_{jk}) + \sum_{i=1}^n h(z_i)} \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \mu_\epsilon^2 \mathbb{E}_\epsilon \left(\exp(\langle \mu_\epsilon \rho_t^\epsilon, h \rangle) \langle \rho_t^\epsilon \otimes \rho_t^\epsilon, e^{\mathbf{D}h(z, z_*, \frac{x-x_*}{\epsilon})} \left((v - v_*) \cdot \frac{x-x_*}{\epsilon} \right)_- \delta_{\text{dist}(x, x_*) = \epsilon + 0} \right) \right), \end{aligned}$$

où on a noté

$$(25) \quad \mathbf{D}h(z, z_*, \omega) := h(x, v - ((v - v_*) \cdot \omega)\omega) + h(x_*, v_* + ((v - v_*) \cdot \omega)\omega) - h(z) - h(z_*).$$

Posons, en observant que $\mathbf{D}h(z, z_*, \omega) = \mathbf{D}h(z, z_*, -\omega)$,

$$(26) \quad J_\epsilon[h](z, z_*) := \int_{\mathbf{S}^2} \left(e^{\mathbf{D}h(z, z_*, \omega)} - 1 \right) \left((v - v_*) \cdot \omega \right)_+ \delta_{\epsilon\omega}(x - x_*) d\omega.$$

Observons que

$$\begin{aligned} \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{T}^3} \psi(x, x_*) \delta_{\text{dist}(x, x_*) = \epsilon} &= \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{S}^2} \psi(x, x + \epsilon\omega) \epsilon^2 dx d\omega \\ &= \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{T}^3} \psi(x, x_*) \left(\epsilon^2 \int_{\mathbf{S}^2} \delta_{\epsilon\omega}(x - x_*) d\omega \right) dx dx_*. \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} & T_2 - T_3 \\ &= \frac{1}{2} \mu_\epsilon^2 \mathbb{E}_\epsilon \left(\exp(\langle \mu_\epsilon \rho_t^\epsilon, h \rangle) \langle \rho_t^\epsilon \otimes \rho_t^\epsilon, (e^{\mathbf{D}h(z, z_*, \frac{x-x_*}{\epsilon})} - 1) \left((v - v_*) \cdot \frac{x-x_*}{\epsilon} \right)_- \delta_{\text{dist}(x, x_*) = \epsilon + 0} \right) \right) \\ &= \frac{1}{2} \mu_\epsilon^2 \mathbb{E}_\epsilon \left(\exp(\langle \mu_\epsilon \rho_t^\epsilon, h \rangle) \left(\frac{1}{\mu_\epsilon} \frac{\partial^2 \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h^2}(t, h) + \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h) \otimes \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h) \right) \cdot \epsilon^2 J_\epsilon[h] \right) \\ &= \frac{1}{2} \exp(\mu_\epsilon \mathcal{K}^\epsilon(t, h)) \mu_\epsilon \left(\frac{1}{\mu_\epsilon} \frac{\partial^2 \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h^2}(t, h) + \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h) \otimes \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h) \right) \cdot J_\epsilon[h]. \end{aligned}$$

On trouve donc que

$$\begin{aligned} \exp(\mu_\epsilon \mathcal{K}^\epsilon(t, h)) \mu_\epsilon \partial_t \mathcal{K}^\epsilon(t, h) &= \exp(\mu_\epsilon \mathcal{K}^\epsilon(t, h)) \mu_\epsilon \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h), v \cdot \nabla_x h \right\rangle \\ &+ \frac{1}{2} \exp(\mu_\epsilon \mathcal{K}^\epsilon(t, h)) \mu_\epsilon \left(\frac{1}{\mu_\epsilon} \frac{\partial^2 \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h^2}(t, h) + \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h) \otimes \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h) \right) \cdot J_\epsilon[h], \end{aligned}$$

c'est-à-dire que

$$(27) \quad \begin{aligned} \partial_t \mathcal{K}^\epsilon(t, h) &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h), v \cdot \nabla_x h \right\rangle \\ &+ \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\mu_\epsilon} \frac{\partial^2 \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h^2}(t, h) + \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h) \otimes \frac{\partial \mathcal{K}^\epsilon}{\partial h}(t, h) \right) \cdot J_\epsilon[h]. \end{aligned}$$

Passons à la limite formellement dans cette équation, en supposant que $\mathcal{K}^\epsilon(t, h)$ converge vers $\mathcal{K}(t, h)$ lorsque $\epsilon \rightarrow 0^+$: il vient

$$(28) \quad \partial_t \mathcal{K}(t, h) = \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, h), v \cdot \nabla_x h \right\rangle + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, h) \otimes \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, h) \cdot J_0[h],$$

avec

$$(29) \quad J_0[h] := \left(\int_{\mathbf{S}^2} (e^{\mathbf{D}h(z, z_*, \omega)} - 1) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega \right) \delta_0(x - x_*).$$

L'équation vérifiée par \mathcal{K} est une équation aux dérivées partielles « fonctionnelle » (puisque la « variable » h appartient à un espace fonctionnel de dimension infinie), de type Hamilton–Jacobi, puisque l'équation obtenue fait intervenir une fonctionnelle non linéaire ne dépendant que de la dérivée première $\partial \mathcal{K} / \partial h$.

Terminons cette section par une mise en garde : la dérivée seconde $\partial^2 \mathcal{K}^\epsilon(t, h) / \partial h^2$ multipliée par le petit paramètre $1/\mu_\epsilon$ dans (27) pourrait évoquer une limite à « viscosité » petite, et faire de la limite (formelle) de (27) vers (28) un résultat analogue à la limite des solutions u_ϵ de l'équation de Burgers

$$\partial_t u_\epsilon + u_\epsilon \partial_x u_\epsilon = \epsilon \partial_x^2 u_\epsilon$$

vers les solutions « entropiques » de l'équation de Hopf

$$\partial_t u + \partial_x \left(\frac{u^2}{2} \right) = 0.$$

Voir par exemple (HOPF, 1950). La définition (23) est d'ailleurs formellement tout à fait analogue à la transformation de Cole–Hopf, formule (3) de (HOPF, 1950). Mais le « coefficient » $J_\epsilon[h] / \mu_\epsilon$ de la dérivée seconde $\partial^2 \mathcal{K}^\epsilon / \partial h^2(t, h)$ n'est ni positif, ni même de signe constant, puisque $\mathbf{D}h$ prend en général des valeurs positives et négatives. En effet, on vérifiera facilement que

$$\mathbf{D}h(x, v, x, v_*, \omega) > 0 \implies \mathbf{D}h(x, v', x, v'_*, -\omega) = -\mathbf{D}h(x, v, x, v_*, \omega) < 0,$$

par le même argument que celui utilisé dans la section 1.6 pour démontrer la formulation faible de l'intégrale de collision de Boltzmann.

2.4. L'équation de Hamilton–Jacobi : principaux résultats

Soient $t, \epsilon > 0$. Dans toute la suite, on notera $\mathbf{Z}_n([0, t])$ la restriction à l'intervalle $[0, t]$ du chemin $\mathbf{R} \ni \tau \mapsto Z_n(\tau) := S_\tau^{n, \epsilon}(Z_n^{in}) \in (\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n$. On notera $\mathbf{z}_j([0, t])$ la j -ième composante de $\mathbf{Z}_n([0, t])$. On notera également $\mathbf{D}_n([0, t])$ l'espace des chemins càdlàg⁽⁵⁾ définis sur $[0, t]$ à valeurs dans $(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n$, muni de la topologie de Skorokhod ((BILLINGSLEY, 1999), chapitre 3, section 12).

Commençons par donner une borne sur la fonction génératrice des cumulants.

5. Acronyme de « continu à droite, [avec] limite à gauche ».

PROPOSITION 2.4. — *On suppose que la fonction de distribution initiale f^{in} vérifie la borne (17). Il existe $C, T_0 > 0$ tels que, pour tout $h : D_1([0, +\infty[) \rightarrow \mathbf{R}$ continue vérifiant*

$$h((x, v)([0, t])) \leq \alpha + \frac{1}{4}\beta_0 \sup_{0 \leq s \leq t} |v(s)|^2,$$

l'on a

$$\left| \frac{1}{\mu_\epsilon} \ln \mathbb{E}_\epsilon \left(\exp \left(\sum_{j=1}^N h(\mathbf{z}_j([0, t])) \right) \right) \right| \leq \frac{CC_0 e^\alpha}{\beta_0^2} \sum_{n \geq 1} \left(\frac{CC_0 e^\alpha}{\beta_0^2} \right)^{n-1} (t + \epsilon)^{n-1} \\ = \frac{CC_0 e^\alpha}{\beta_0^2 - CC_0 e^\alpha (t + \epsilon)}$$

pour $t + \epsilon < \min \left(T_0, \frac{\beta_0^2 e^{-\alpha}}{CC_0} \right) := T_\alpha[C_0, \beta_0]$.

Cette borne supérieure est démontrée dans le chapitre 8 de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022d) (Théorème 10, voir aussi le Théorème 4 du chapitre 4 de cette même référence). Elle implique une borne sur F_2^ϵ utilisée dans la preuve du Corollaire 1.6.

À partir de là, on va modifier légèrement la définition de la fonctionnelle \mathcal{K}^ϵ de façon à y inclure le terme de transport libre $\left\langle \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, h), v \cdot \nabla_x h \right\rangle$. Pour cela, on considère des fonctions test h de la forme

$$h(z([0, t])) := g(t, z(t)) - \int_0^t (\partial_t + v \cdot \nabla_x) g(s, z(s)) ds.$$

Soit

$$\mathbf{B}_\alpha := \{g \in C^1([0, T_\alpha] \times \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3; \mathbf{C}) \text{ t.q. } |g(t, z)| \leq (1 - \frac{t}{2T_\alpha})(\alpha + \frac{1}{8}\beta_0|v|^2) \\ \text{et } \sup_{0 \leq t \leq T_\alpha} |(\partial_t + v \cdot \nabla_x) g(t, z)| \leq \frac{1}{2T_\alpha}(\alpha + \frac{1}{8}\beta_0|v|^2)\}.$$

Évidemment, si $g \in \mathbf{B}_\alpha$, on a

$$|h(z([0, t]))| \leq |g(t, z(t))| + \int_0^t |(\partial_t + v \cdot \nabla_x) g(s, z(s))| ds \leq (\alpha + \frac{1}{8}\beta_0|v|^2),$$

de sorte que la borne uniforme de la proposition ci-dessus s'applique.

PROPOSITION 2.5. — *On suppose que la fonction de distribution initiale f^{in} vérifie la borne (17). Soit $\alpha > 0$; pour tout $t \in [0, T_\alpha[$ (où T_α est comme dans la Proposition 2.4) et tout $g \in \mathbf{B}_\alpha$, on pose*

$$\mathbf{K}(t, g) := \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\mu_\epsilon} \ln \mathbb{E}_\epsilon \left(\exp \left(\sum_{j=1}^N h(\mathbf{z}_j([0, t])) \right) \right),$$

où

$$h(z([0, t])) = g(t, z(t)) - \int_0^t (\partial_t + v \cdot \nabla_x) g(s, z(s)) ds.$$

Pour tous $t \in [0, T_\alpha[$ et $g \in \mathbf{B}_\alpha$, la dérivée fonctionnelle $\partial \mathbf{K}(t, g)/\partial g(t)$ s'identifie à une fonction continue sur \mathbf{T}^3 à valeurs dans l'espace des mesures de Radon sur \mathbf{R}^3 , et pour tout $t \in [0, T_\alpha[$, il existe $C(t) > 0$ tel que

$$\sup_{0 \leq s \leq t} \sup_{x \in \mathbf{T}^3} \left\| (1 + |v|) \exp(\tfrac{1}{8}\beta_0|v|^2) \frac{\partial \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(s)}(x, \cdot) \right\|_{VT} \leq C(t).$$

Les énoncés ci-dessus nous permettent alors de préciser l'équation de Hamilton–Jacobi obtenue à la section précédente par un calcul formel.

THÉORÈME 2.6. — *On suppose que la fonction de distribution initiale f^{in} vérifie la borne (17). Soit $\alpha > 0$; la fonction \mathbf{K} définie sur $[0, T_\alpha[\times \mathbf{B}_\alpha$ est une solution de la forme intégrée en t de l'équation de Hamilton–Jacobi*

$$(30) \quad \begin{cases} \partial_t \mathbf{K}(t, g) = \mathcal{H} \left(\frac{\partial \mathbf{K}(t, g)}{\partial g(t)}, g(t) \right), & (t, g) \in [0, T_\alpha[\times \mathbf{B}_\alpha, \\ \mathbf{K}(0, g) = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} (e^{g(0, z)} - 1) f^{in}(z) dz, \end{cases}$$

où le hamiltonien \mathcal{H} est défini par la formule suivante :

$$(31) \quad \mathcal{H}(p, q) := \frac{1}{2} \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} (e^{\mathbf{D}q(x, v, x_* v_*, \omega)} - 1) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega p(x, dv) p(x, dv_*) dx$$

pour toute fonction $q \in C(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)$ vérifiant

$$\sup_{x \in \mathbf{T}^3} |q(x, v)| \leq c + \tfrac{1}{8}\beta_0|v|^2, \quad v \in \mathbf{R}^3,$$

et tout $p \in C(\mathbf{T}^3; \mathcal{M}(\mathbf{R}^3))$ vérifiant

$$\sup_{x \in \mathbf{T}^3} \left\| (1 + |v|) \exp(\tfrac{1}{8}\beta_0|v|^2) \frac{\partial \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(s)}(x, \cdot) \right\|_{VT} < +\infty.$$

On rappelle enfin que la notation $\mathbf{D}q$ est définie dans (25).

Ce théorème est l'un des résultats majeurs de BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA (2022d). Nous verrons plus loin qu'il a des applications importantes, d'une part à l'étude des fluctuations autour de l'équation de Boltzmann, et d'autre part à celle des grandes déviations dans la limite de Boltzmann–Grad. On pourrait s'interroger sur l'intérêt de remplacer la dynamique à N corps (1)-(2)-(3), posée sur un l'espace des phases $(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^N$ de dimension $6N$, grande mais finie, par l'équation (30), posée sur un espace de dimension infinie. Comme elle est obtenue après passage à la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$, on peut toutefois espérer que la dynamique sous-jacente à (30) soit plus simple que la dynamique à N corps.

2.5. De l'équation de Hamilton–Jacobi à l'équation de Boltzmann

Une première observation est que l'équation de Boltzmann peut se déduire de l'équation de Hamilton–Jacobi (30).

PROPOSITION 2.7. — *On suppose que la fonction de distribution initiale f^{in} vérifie la borne (17). Soit*

$$f(t, \cdot) := \frac{\partial \mathbf{K}(t, g)}{\partial g(t)} \Big|_{g=0} \in C(\mathbf{T}^3; \mathcal{M}(\mathbf{R}^3)).$$

Alors f est solution faible de l'équation de Boltzmann sous forme intégrée en temps avec donnée initiale f^{in} .

Commençons par un calcul formel à partir de l'équation (28).

Argument formel. — Revenons à la fonctionnelle \mathcal{K} . Dérivons chaque membre de (28) en h dans la direction ϕ :

$$\begin{aligned} \partial_t \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, h), \phi \right\rangle &= \frac{\partial^2 \mathcal{K}}{\partial h^2}(t, h) \cdot (\phi, v \cdot \nabla_x h) + \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, h), v \cdot \nabla_x \phi \right\rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \mathcal{K}}{\partial h^2}(t, h) \otimes \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, h) \cdot (\phi, J_0[h]) \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, h) \otimes \frac{\partial^2 \mathcal{K}}{\partial h^2}(t, h) \cdot (J_0[h], \phi) \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, h) \otimes \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, h) \cdot \left(\frac{dJ_0}{dh}[h] \cdot \phi \right), \end{aligned}$$

puis faisons $h = 0$ dans cette équation. Comme $J_0[0] = 0$, il vient

$$\begin{aligned} \partial_t \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, 0), \phi \right\rangle &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, 0), v \cdot \nabla_x \phi \right\rangle \\ &\quad + \frac{1}{2} \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, 0) \otimes \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, 0) \cdot \left(\frac{dJ_0}{dh}[0] \cdot \phi \right). \end{aligned}$$

Un calcul simple montre que

$$\frac{dJ_0}{dh}[0] \cdot \phi = \left(\int_{\mathbf{S}^2} \mathbf{D}\phi(z, z_*, \omega) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega \right) \delta_0(x - x_*).$$

Posons $m(t, \cdot) := \frac{\partial \mathcal{K}}{\partial h}(t, 0)$, que nous allons manipuler comme une fonction continue sur \mathbf{T}^3 à valeurs dans les mesures de Radon sur \mathbf{R}^3 . Alors

$$\begin{aligned} &\left\langle m(t) \otimes m(t), \frac{dJ_0}{dh}[0] \cdot \phi \right\rangle \\ &= \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} \mathbf{D}\phi(x, v, x, v_*, \omega) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega m(t, x, dv) m(t, x, dv_*) dx. \end{aligned}$$

On est arrivé ainsi à l'identité satisfaite par $m(t, \cdot)$ pour toute fonction test ϕ dans un espace bien choisi (par exemple $C_c^\infty(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)$) :

$$\langle \partial_t m(t), \phi \rangle = \langle m(t), v \cdot \nabla_x \phi \rangle + \frac{1}{2} \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} \mathbf{D}\phi(x, v, x, v_*, \omega) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega m(t, x, dv) m(t, x, dv_*) dx,$$

qui n'est rien d'autre que la formulation faible de l'équation de Boltzmann (14). \square

Passons à l'argument rigoureux basé sur le Théorème 2.6. Commençons par une observation élémentaire, basée sur l'idée suivante : dans la fonctionnelle $\mathbf{K}(t, g)$, on doit considérer $g(t, \cdot)$ et $(\partial_t + v \cdot \nabla_x)g(\tau, \cdot)|_{\tau \in [0, t]}$ comme deux « variables » indépendantes — on reviendra d'ailleurs plus loin sur ce point précis.

LEMME 2.8. — Soient $\alpha > 0$ et $\sigma, \tau \in [0, T_\alpha]$. L'application $\mathbf{B}_\alpha \ni g \mapsto g(s, \cdot) \in \mathbf{C}$ est de classe C^1 , et sa dérivée partielle par rapport à $g(\tau, \cdot)$ « à $(\partial_t + v \cdot \nabla_x)g$ constant » est donnée par la formule⁽⁶⁾

$$\left(\frac{\partial g(\sigma, \cdot)}{\partial g(\tau, \cdot)} \right)_{(\partial_t + v \cdot \nabla_x)g} = A_{\sigma - \tau},$$

où $A_\theta := e^{-\theta v \cdot \nabla_x}$ est le groupe à un paramètre engendré par l'opérateur d'advection, donné par la formule $(A_\theta \psi)(x, v) := \psi(x - \theta v, v)$.

Démonstration. — Exprimons $g(\sigma, \cdot)$ en fonction de $g(\tau, \cdot)$ et de $(\partial_t + v \cdot \nabla_x)g(\tau, \cdot)|_{t \in [0, T_\alpha]}$ en observant que

$$g(\sigma, x, v) = g(t, x + (\tau - \sigma)v, v) - \int_\sigma^\tau (\partial_t + v \cdot \nabla_x)g(\theta, x + (\theta - \sigma)v, v) d\theta,$$

c'est-à-dire que

$$g(\sigma, \cdot) = A_{\sigma - \tau} g(\tau, \cdot) - \int_\sigma^\tau A_{\sigma - \theta} (\partial_t + v \cdot \nabla_x)g(\theta, \cdot) d\theta.$$

La formule annoncée en découle aussitôt. \square

Démonstration. — On rappelle la condition initiale de (30) :

$$\mathbf{K}(0, g) = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} (e^{g(0, z)} - 1) f^{in}(z) dz,$$

d'où l'on tire immédiatement que

$$\left\langle \frac{\partial \mathbf{K}(0, g)}{\partial g(0)}, \psi \right\rangle = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} e^{g(0, z)} \psi(z) f^{in}(z) dz.$$

Puis, d'après le lemme ci-dessus et la règle de dérivation des fonctions composées

$$(32) \quad \left\langle \frac{\partial \mathbf{K}(0, g)}{\partial g(t)}, \psi \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \mathbf{K}(0, g)}{\partial g(0)}, A_{-t} \psi \right\rangle = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} e^{g(0, z)} A_{-t} \psi(z) f^{in}(z) dz.$$

6. On s'est résolu faute de mieux à employer ici la notation regrettable en usage dans les traités classiques de thermodynamique, à savoir $(\partial f / \partial x)_y$ pour désigner la dérivée partielle de f par rapport à la variable x , la variable y restant constante dans la prise de dérivée.

Ensuite, on écrit la forme intégrée en t de (30) :

$$\mathbf{K}(t, g) = \mathbf{K}(0, g) + \int_0^t \mathcal{H} \left(\frac{\partial \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(s)}, g(s) \right) ds,$$

et on dérive chaque membre de cette égalité par rapport à $g(t, \cdot)$ dans la direction ψ , en utilisant de nouveau la règle de dérivation des fonctions composées et le Lemme 2.8 pour trouver que

$$(33) \quad \begin{aligned} \left\langle \frac{\partial \mathbf{K}(t, g)}{\partial g(t)}, \psi \right\rangle &= \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} e^{g(0, z)} A_{-t} \psi(z) f^{in}(z) dz \\ &+ \int_0^t \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \left(\frac{\partial \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(s)}, g(s) \right), \frac{\partial^2 \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(t) \partial g(s)} \cdot (\psi, \cdot) \right\rangle ds \\ &+ \int_0^t \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q} \left(\frac{\partial \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(s)}, g(s) \right), A_{s-t} \psi \right\rangle ds. \end{aligned}$$

La formule (31) implique que

$$(34) \quad \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}(p, q), \tilde{p} \right\rangle = \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} (e^{\mathbf{D}q(x, v, x_* v_*, \omega)} - 1) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega p(x, dv) \tilde{p}(x, dv_*) dx$$

d'où l'on tire en particulier que

$$(35) \quad \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}(p, 0), \tilde{p} \right\rangle = 0.$$

D'autre part

$$(36) \quad \begin{aligned} &2 \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}(p, q), \psi \right\rangle \\ &= \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} e^{\mathbf{D}q(x, v, x_* v_*, \omega)} \mathbf{D}\psi(x, v, x_* v_*, \omega) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega p(x, dv) p(x, dv_*) dx, \end{aligned}$$

d'où

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}(p, 0), \psi \right\rangle = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} \mathbf{D}\psi(x, v, x_* v_*, \omega) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega p(x, dv) p(x, dv_*) dx.$$

Spécialisons (33) à $g = 0$: il vient

$$\langle f(t, \cdot), \psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \mathbf{K}(t, g)}{\partial g(t)} \Big|_{g=0}, \psi \right\rangle + \int_0^t \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}(f(s, \cdot), 0), A_{s-t} \psi \right\rangle ds,$$

c'est-à-dire

$$\begin{aligned} \langle f(t, \cdot), \psi \rangle &= \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \psi(z) A_t f^{in}(z) dz + \frac{1}{2} \int_0^t \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} \mathbf{D}\psi(x, v, x_* v_*, \omega) \\ &\quad \times A_{t-s} f(s, x, v) A_{t-s} f(s, x, v_*) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega dv dv_* dx. \end{aligned}$$

On reconnaît dans cette identité une formulation faible intégrée en temps de l'équation de Boltzmann — cette écriture utilise la troisième formulation faible de l'intégrale des

collisions de Boltzmann rappelée dans la section 1.6, ainsi que la formule de Duhamel pour traiter l’opérateur d’advection dans l’équation de Boltzmann (14). \square

3. GRANDES DÉVIATIONS

Dans cette section, on va voir comment la fonctionnelle \mathbf{K} et l’équation de Hamilton–Jacobi qu’elle vérifie interviennent dans l’étude des grandes déviations pour un système de sphères dures dans la limite de Boltzmann–Grad.

On va considérer une variante à poids de l’équation de Boltzmann :

$$(37) \quad \begin{aligned} & (\partial_t + v \cdot \nabla_x) \phi(t, x, v) \\ &= \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} \left(\phi(t, x, v'_*) \phi(t, x, v') e^{-\mathbf{D}q(t, x, v, x, v_*, \omega)} - \phi(t, x, v_*) \phi(t, x, v) e^{\mathbf{D}q(t, x, v, x, v_*, \omega)} \right) \\ & \quad \times ((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv_* d\omega, \end{aligned}$$

avec condition initiale

$$(38) \quad \phi(0, x, v) = f^{in}(x, v) e^{q(0, x, v)}.$$

On supposera que la fonction $q \equiv q(t, x, v)$ est lipschitzienne sur $[0, T] \times \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$. Pour tous $r, T > 0$, on considère

$\mathcal{R}_{r, T} := \{ \phi : [0, T] \times \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3 \rightarrow \mathbf{R}_+ \text{ solution forte de (37)-(38) pour une fonction}$

$$q \text{ telle que } \|q\|_{W^{1, \infty}([0, T] \times \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)} \leq r \}.$$

Maintenant, on va regarder la mesure empirique $t \mapsto \rho_t^\epsilon$ comme élément de l’espace $D([0, T], \mathcal{M}_+^1(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3))$ des chemins càdlàg à valeurs dans l’espace des mesures positives sur $\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$ de masse finie muni de la topologie faible. L’espace $D([0, T], \mathcal{M}_+^1(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3))$ est muni de la topologie de Skorokhod. Soient γ_1 et γ_2 deux éléments de $D([0, T], \mathcal{M}_+^1(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3))$; posons

$$d_{[0, T]}(\gamma_1, \gamma_2) := \inf_{\alpha \in \mathcal{A}_T} \max \left(\sup_{0 \leq t \leq T} |\alpha(t) - t|, \sup_{0 \leq t \leq T} \mathbf{d}(\gamma_1(t), \gamma_2(\alpha(t))) \right)$$

où \mathcal{A}_T est l’ensemble des bijections croissantes de $[0, T]$ dans lui-même, et où

$$\mathbf{d}(m_1, m_2) = \sum_{n \geq 1} 2^{-n} |\langle m_1 - m_2, \chi_n \rangle|,$$

sachant que $(\chi_n)_{n \geq 1}$ est une suite dense dans l’espace $C_0(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)$ des fonctions continues tendant vers 0 à l’infini. La distance $d_{[0, T]}$ définit la topologie de Skorokhod sur l’espace $D([0, T], \mathcal{M}_+^1(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3))$ (voir (BILLINGSLEY, 1999), chapitre 3, section 12).

Le principaux résultats concernant les grandes déviations de la mesure empirique d’un système de sphères dures dans la limite de Boltzmann–Grad sont résumés dans le théorème suivant, qui regroupe les Théorèmes 3 et 9 de BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA (2022d).

THÉORÈME 3.1. — Supposons que f^{in} vérifie (17). Pour tout $r > 0$, il existe $\alpha \equiv \alpha[r, \beta_0, C_0] > 0$ et $T_r \in]0, T_\alpha[$ tels que, dans la limite de Boltzmann–Grad

(a) pour tout fermé $\mathcal{G} \subset D([0, T_r], \mathcal{M}_+^1(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3))$ pour la distance $d_{[0, T_r]}$

$$\overline{\lim}_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\mu_\epsilon} \ln \mathbb{P}_\epsilon(\rho^\epsilon \in \mathcal{G}) \leq - \inf_{\phi \in \mathcal{G}} \mathbf{K}^*(T_r, \phi),$$

(b) pour tout ouvert $\mathcal{O} \subset D([0, T_r], \mathcal{M}_+^1(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3))$ pour la distance $d_{[0, T_r]}$

$$\underline{\lim}_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\mu_\epsilon} \ln \mathbb{P}_\epsilon(\rho^\epsilon \in \mathcal{O}) \geq - \inf_{\phi \in \mathcal{O} \cap \mathcal{R}_{r, T}} \mathbf{K}^*(T_r, \phi).$$

Ici \mathbf{K}^* est la transformée de Legendre de \mathbf{K} : pour tout $\phi \in D([0, T], \mathcal{M}_+^1(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3))$

$$\mathbf{K}^*(T, \phi) := \sup_{g \in \mathbf{B}_\alpha} (\langle \phi(T, \cdot), g(T, \cdot) \rangle - \langle \phi, (\partial_t + v \cdot \nabla_x) g \rangle - \mathbf{K}(T, g)),$$

où on a noté

$$\langle \phi, q \rangle := \int_0^T \langle \phi(t, \cdot), q(t, \cdot) \rangle dt.$$

En particulier, pour tout $\phi \in \mathcal{R}_{r, T_r}$

$$\begin{aligned} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \overline{\lim}_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\mu_\epsilon} \ln \mathbb{P}_\epsilon \left(d_{[0, T_r]}(\rho^\epsilon, \phi) \leq \eta \right) &= -\mathbf{K}^*(T_r, \phi), \\ \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \underline{\lim}_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\mu_\epsilon} \ln \mathbb{P}_\epsilon \left(d_{[0, T_r]}(\rho^\epsilon, \phi) < \eta \right) &= -\mathbf{K}^*(T_r, \phi). \end{aligned}$$

Ce résultat fait l’objet du chapitre 7 de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022d). Sa démonstration met en jeu quelques propriétés importantes sur l’équation de Hamilton–Jacobi de la section précédente, dont nous allons donner une idée.

Précisons que ce type de résultat avait été conjecturé auparavant par Rezakhanlou dans (REZAKHANLOU et VILLANI, 2008) et par BOUCHET (2020) — avec toutefois une formule apparemment différente de celle du Théorème 3.1 pour la fonctionnelle des grandes déviations $\mathbf{K}^*(T, \phi)$: on y reviendra dans la suite.

3.1. Méthode des caractéristiques pour l’équation de Hamilton–Jacobi

Soit $t \in [0, T_\alpha]$. Considérons le système hamiltonien

$$(39) \quad \begin{aligned} (\partial_s + v \cdot \nabla_x) \phi_t(s, \cdot) &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}(\phi_t(s, \cdot), q_t(s, \cdot)), & \phi_t(0, \cdot) &= f^{in} e^{q(0, \cdot)}, \\ (\partial_s + v \cdot \nabla_x) (q_t - g)(s, \cdot) &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}(\phi_t(s, \cdot), q_t(s, \cdot)), & q_t(t, \cdot) &= g(t, \cdot). \end{aligned}$$

Grâce à la formule (36), on vérifie sans peine que la première de ces deux équations n’est autre que (37)-(38) : ce point sera établi plus loin (voir section 3.2).

PROPOSITION 3.2. — Soit $\alpha > 0$ et $g \in \mathbf{B}_\alpha$. Soit (ϕ_t, q_t) solution du système (39). Posons

$$(40) \quad \hat{\mathbf{K}}(t, g) := \langle f^{in}, e^{qt(0, \cdot)} - 1 \rangle + \langle \phi_t, (\partial_s + v \cdot \nabla_x)(q_t - g) \rangle + \int_0^t \mathcal{H}(\phi_t(s, \cdot), q_t(s, \cdot)) ds.$$

Alors $\hat{\mathbf{K}}$ est solution de (30) sur $[0, t]$, et vérifie en outre

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{K}}(t, g)}{\partial g(t)} = \phi_t(t), \quad \frac{\partial \hat{\mathbf{K}}(t, g)}{\partial (\partial_t g + v \cdot \nabla_x g)} = -\phi_t.$$

La théorie classique de l'équation de Hamilton–Jacobi dit que le graphe de la différentielle de la solution de l'équation de Hamilton–Jacobi en la variable d'espace est invariant par le flot des équations de Hamilton. C'est bien ce qu'exprime la proposition ci-dessus, à condition de considérer que les soi-disant variables $g(t, \cdot)$ et $(\partial_s + v \cdot \nabla_x)g$ sont non seulement indépendantes comme on l'a dit plus haut, mais encore conjuguées au sens de la théorie des systèmes hamiltoniens.

Cette proposition suggère d'étudier (a) l'unicité de la solution de l'équation d'Hamilton–Jacobi (30), et (b) l'existence et unicité pour le système des équations de Hamilton (39) (cf. section 7.2 dans le chapitre 7 de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022d)). Cette étude est largement basée sur une variante du théorème de Cauchy–Kowalevski de NIRENBERG (1972) et OVSJANNIKOV (1971) (voir Appendice de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022d)), déjà utilisée dans la preuve du théorème de Lanford (voir section 5.3 dans (GOLSE, 2014)). Au terme de cette étude, on aboutit à l'énoncé suivant.

PROPOSITION 3.3. — Soit $\alpha > 0$. Il existe $T_\alpha^* \in]0, T_\alpha]$ tel que la fonctionnelle $\hat{\mathbf{K}}$ soit définie sur $[0, T_\alpha^*] \times \mathbf{B}_\alpha$, et

$$\mathbf{K}(t, g) = \hat{\mathbf{K}}(t, g), \quad \text{pour tout } (t, g) \in [0, T_\alpha^*] \times \mathbf{B}_\alpha.$$

3.2. Transformée de Legendre

Soit $\bar{\phi}$, solution de (37) avec condition initiale (38) pour une fonction poids lipschitzienne \bar{q} telle que $\|\bar{q}\|_{W^{1,\infty}([0, T_0] \times \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)} < r$. Rappelons que, d'après la formule (36),

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}(p, q), \psi \right\rangle \\ &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} e^{\mathbf{D}q(x, v, x, v_*, \omega)} \mathbf{D}\psi(x, v, x, v_*, \omega) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega p(x, v) p(x, v_*) dv dv_* dx \\ &= \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} e^{\mathbf{D}q(x, v, x, v_*, \omega)} (\psi(x, v') - \psi(x, v)) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega p(x, v) p(x, v_*) dv dv_* dx \\ &= \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} \left(e^{-\mathbf{D}q(x, v, x, v_*, \omega)} p(x, v') p(x, v'_*) - e^{\mathbf{D}q(x, v, x, v_*, \omega)} p(x, v) p(x, v_*) \right) \\ & \quad \times ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega dv_* \psi(x, v) dv dx. \end{aligned}$$

La deuxième égalité ci-dessus s'obtient par la même démonstration que celle de la troisième égalité dans la formulation faible de l'intégrale des collisions de Boltzmann de

la section 1.6 (par échange de v et v_*). La troisième égalité s’obtient comme la seconde égalité dans la formulation faible de l’intégrale des collisions de Boltzmann de la section 1.6 (en utilisant la transformation $(v, v_*) \mapsto (v', v'_*)$ à ω fixé définie par (16)). Ainsi

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}(p, q) = \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} \left(e^{-\mathbf{D}q(x, v, v_*, \omega)} p(x, v') p(x, v'_*) - e^{\mathbf{D}q(x, v, v_*, \omega)} p(x, v) p(x, v_*) \right) \times ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega dv_*,$$

ce qui montre que l’équation de Boltzmann à poids (37) avec condition initiale (38) coïncide avec la première équation du système hamiltonien (39), comme annoncé plus haut.

En utilisant de nouveau une variante du théorème de Cauchy-Kowalevski de NIRENBERG (1972) et OVSJANNIKOV (1971), on montre que le problème de Cauchy (37)-(38) admet une unique solution sur l’intervalle $[0, T_0 e^{-5r}]$, vérifiant la borne

$$\sup_{0 \leq t \leq T_0 e^{-5r}} \|\bar{\phi}(t, \cdot) \exp(\frac{1}{4}\beta_0 |v|^2)\|_{L^\infty(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)} \leq 4C_0 e^r.$$

On vérifie de même que pour l’équation de Boltzmann originale (14) que les solutions de l’équation de Boltzmann à poids (37) sont de masse, d’impulsion et d’énergie constantes :

$$\langle (\partial_s + v \cdot \nabla_x) \bar{\phi}(s, \cdot), 1 \rangle = \langle (\partial_s + v \cdot \nabla_x) \bar{\phi}(s, \cdot), v_i \rangle = \langle (\partial_s + v \cdot \nabla_x) \bar{\phi}(s, \cdot), |v|^2 \rangle = 0$$

pour $i = 1, 2, 3$. La démonstration suit de près celle des lois de conservation locales établies dans la section 1.6 pour l’équation de Boltzmann originale.

PROPOSITION 3.4. — *Supposons que f^{in} vérifie (17). Pour tout $r > 0$, il existe $\alpha \equiv \alpha[r, \beta_0, C_0] > 0$ et $T_r \in]0, T_\alpha[$ tels que*

$$\mathbf{K}^*(t, \phi) = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \left(\phi(0, z) \ln \left(\frac{\phi(0, z)}{f^{in}(z)} \right) - \phi(0, z) + f^{in}(z) \right) dz + \sup_{q \in L^\infty([0, t] \times \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)} \left(\langle (\partial_s + v \cdot \nabla_x) \phi, q \rangle - \int_0^t \mathcal{H}(\phi(s, \cdot), q(s, \cdot)) ds \right).$$

Or la première équation du système hamiltonien (39) exprime précisément le fait que la fonction \bar{q} , c’est-à-dire la fonction poids dans (37)-(38), est un point critique pour le problème variationnel de la proposition ci-dessus. Comme d’autre part la solution $\bar{\phi}$ vérifie $\bar{\phi} \geq 0$, on déduit de la formule (31) que

$$q \mapsto \mathcal{H}(\bar{\phi}(s, \cdot), q)$$

est convexe. Par conséquent

$$\begin{aligned} & \sup_{q \in L^\infty([0, t] \times \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)} \left(\langle (\partial_s + v \cdot \nabla_x) \phi, q \rangle - \int_0^t \mathcal{H}(\phi(s, \cdot), q(s, \cdot)) ds \right) \\ &= \langle (\partial_s + v \cdot \nabla_x) \bar{\phi}, \bar{q} \rangle - \int_0^t \mathcal{H}(\bar{\phi}(s, \cdot), \bar{q}(s, \cdot)) ds. \end{aligned}$$

Cette formule permet donc de calculer « explicitement » la fonctionnelle des grandes déviations intervenant dans le Théorème 3.1 par la méthode des caractéristiques, c'est-à-dire en résolvant le système hamiltonien (39).

La Proposition 3.4 montre que la fonctionnelle des grandes déviations obtenue dans le Théorème 3.1 coïncide bien avec celle conjecturée dans les travaux de Rezakhanlou (Conjecture 4 du texte de Rezakhanlou dans (REZAKHANLOU et VILLANI, 2008)), et de Bouchet (formule (27) de (BOUCHET, 2020)).

Terminons par une remarque intéressante — qui joue un rôle dans la démonstration des résultats de cette section (voir (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022d), chapitre 7, section 7.2).

Il est commode de changer les variables (p, q) du hamiltonien (31) en posant $P = pe^{-q}$ et $Q = e^q$, d'où

$$(41) \quad \mathcal{H}(p, q) = \frac{1}{2} \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} (Q(x, v')Q(x, v'_*) - Q(x, v)Q(x, v_*)) \\ \times ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega P(x, dv)P(x, dv_*)dx = \mathcal{H}'(P, Q).$$

Un calcul simple montre que

$$\frac{\partial H'}{\partial P}(P, Q) = \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (Q(x, v')Q(x, v'_*) - Q(x, v)Q(x, v_*)) P(x, v_*) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv_* d\omega, \\ \frac{\partial H'}{\partial Q}(P, Q) = \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (P(x, v')P(x, v'_*) - P(x, v)P(x, v_*)) Q(x, v_*) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv_* d\omega.$$

On peut alors réécrire le système (39) au moyen des nouvelles fonctions inconnues $\gamma_t := \phi_t e^{-qt}$ et $\eta_t = e^{qt}$: on trouve sans difficulté (7) que

$$(\partial_s + v \cdot \nabla_x) \gamma_t + \gamma_t (\partial_s + v \cdot \nabla_x) g = \frac{\partial H'}{\partial Q}(\gamma_t, \eta_t) \\ = + \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (\gamma'_t \gamma'_{t*} - \gamma_t \gamma_{t*}) \eta_{t*} ((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv_* d\omega, \\ (\partial_s + v \cdot \nabla_x) \eta_t - \eta_t (\partial_s + v \cdot \nabla_x) g = - \frac{\partial H'}{\partial P}(\gamma_t, \eta_t) \\ = - \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (\eta'_t \eta'_{t*} - \eta_t \eta_{t*}) \gamma_{t*} ((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv_* d\omega,$$

système posé sur $[0, t] \times \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$ avec les conditions aux limites

$$\gamma_t(0, \cdot) = f^{in}, \quad \eta_t(t, \cdot) = e^{g(t, \cdot)}.$$

La structure de ce nouveau système hamiltonien est intéressante : il s'agit de deux équations de Boltzmann à poids, mais *avec des sens opposés de propagation du temps*.

7. En notant $f' = f(t, x, v')$ et $f'_* = f(t, x, v'_*)$, tandis que $f_* = f(t, x, v_*)$, et que les vitesses v', v'_* sont données par (16) en fonction de v, v_* et ω .

Comme il s’agit de prouver l’existence et l’unicité de solutions à des équations de type Boltzmann sans utiliser la flèche du temps « naturelle », à savoir celle pour laquelle

$$t \mapsto \iint_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \phi(t, x, v) \ln \phi(t, x, v) dx dv \text{ est décroissante,}$$

il n’est pas très étonnant que la démonstration repose de nouveau sur le théorème de Cauchy-Kowalevski abstrait de NIRENBERG (1972) et OVSJANNIKOV (1971) : voir la Proposition 7.2.3 de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022d).

4. FLUCTUATIONS

Dans cette section, on va s’intéresser au champ de fluctuations (21) de la mesure empirique ρ_t^ϵ dans la limite de Boltzmann–Grad. Rappelons-en la définition :

$$\begin{aligned} \langle \zeta_t^\epsilon, \phi \rangle &:= \sqrt{\mu_\epsilon} (\langle \rho_t^\epsilon, \phi \rangle - \mathbb{E}_\epsilon(\langle \rho_t^\epsilon, \phi \rangle)) \\ &= \frac{1}{\sqrt{\mu_\epsilon}} \left(\sum_{i=1}^N \phi(\mathbf{z}_i(t)) - \mu_\epsilon \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} F_1^\epsilon(t, z) \phi(z) dz \right). \end{aligned}$$

Puisqu’il s’agit de décrire les fluctuations de la mesure empirique autour de F_1^ϵ qui converge vers une solution de l’équation de Boltzmann, nous aurons évidemment besoin des opérateurs linéarisés (adjoints) associés à l’équation de Boltzmann (14) autour d’une solution f définie sur $[0, T] \times \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_t^* \phi(z) &:= v \cdot \nabla_x \phi(z) + \mathbf{L}_t^* \phi(z), \quad \text{où on a posé} \\ \mathbf{L}_t^* \phi(z) &:= \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} \mathbf{D} \phi(x, v, x, v_*, \omega) f(t, x, v_*) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv_* d\omega. \end{aligned}$$

THÉORÈME 4.1. — *Supposons que f^{in} vérifie (17). Il existe $T^* \equiv T^*[C_0, \beta_0] > 0$ tel que, dans la limite de Boltzmann–Grad, ζ_t^ϵ converge en loi vers ζ_t pour tout $t \in [0, T^*]$ lorsque $\epsilon \rightarrow 0^+$, où ζ_t est le processus gaussien centré solution de*

$$(42) \quad d\zeta_t = \mathcal{L}_t \zeta_t dt + db_t, \quad 0 < t < T^*,$$

et où b_t est un bruit gaussien delta-corrélé en t, x , de covariance

$$\begin{aligned} \mathbf{Cov}(t, \phi, \psi) &:= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} \mathbf{D} \phi(x, v, x, v_*, \omega) \mathbf{D} \psi(x, v, x, v_*, \omega) \\ &\quad \times f(t, x, v) f(t, x, v_*) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ dx dv dv_* d\omega. \end{aligned}$$

De plus ζ_0 est le champ gaussien centré de covariance

$$\mathbb{E}(\langle \zeta_0, \phi \rangle \langle \zeta_0, \psi \rangle) = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \phi(z) \psi(z) f^{in}(z) dz.$$

Spohn avait conjecturé ce résultat dans (SPOHN, 1981) : voir l’équation (4.1) de cette référence, ainsi que l’article antérieur (VAN BEIJEREN, LANFORD, LEBOWITZ et SPOHN, 1980) dans le cas où la solution de l’équation de Boltzmann considérée est un équilibre maxwellien (20).

4.1. Solutions faibles de (42)

Précisons la notion de solution de l'équation de Boltzmann aux fluctuations (42). Soit $U(t, s)$ le flot engendré par l'opérateur de Boltzmann linéarisé \mathcal{L}_t : autrement dit

$$\partial_t U(t, s)\phi - \mathcal{L}_t U(t, s)\phi = 0, \quad U(s, s)\phi = \phi, \quad 0 \leq s \leq t \leq T^*.$$

En dérivant par rapport à t_2 la relation de flot $U(t_1, t_3) = U(t_1, t_2)U(t_2, t_3)$, il vient

$$\partial_s U(t, s)\phi + U(t, s)\mathcal{L}_s\phi = 0, \quad U(t, t)\phi = \phi, \quad 0 \leq s \leq t \leq T^*.$$

Puis, par passage à l'adjoint, on trouve que

$$\begin{aligned} \partial_s U(t, s)^*\phi + \mathcal{L}_s^* U(t, s)^*\phi &= 0, & U(t, t)^*\phi &= \phi, & 0 \leq s \leq t \leq T^*, \\ \partial_t U(t, s)^*\phi - U(t, s)^*\mathcal{L}_t^*\phi &= 0, & U(s, s)^*\phi &= \phi, & 0 \leq s \leq t \leq T^*. \end{aligned}$$

Formellement, la solution de (42) vérifie

$$\langle \zeta_t, \phi \rangle = \langle \zeta_0, U(t, 0)^*\phi \rangle + \int_0^t \langle db_s, U(t, s)^*\phi \rangle$$

pour toute fonction test ϕ . Donc

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{C}}(t, s, \psi, \phi) &:= \mathbb{E}(\langle \zeta_t, \psi \rangle \langle \zeta_s, \phi \rangle) = \mathbb{E}(\langle \zeta_0, U(t, 0)^*\psi \rangle \langle \zeta_0, U(s, 0)^*\phi \rangle) \\ &\quad + \mathbb{E} \left(\int_0^t \int_0^s \langle db_\tau, U(t, \tau)^*\phi \rangle \langle db_\sigma, U(s, \sigma)^*\phi \rangle \right) \\ &\quad + \mathbb{E} \left(\langle \zeta_0, U(t, 0)^*\psi \rangle \int_0^s \langle db_\sigma, U(s, \sigma)^*\phi \rangle d\sigma \right) \\ &\quad + \mathbb{E} \left(\langle \zeta_0, U(s, 0)^*\psi \rangle \int_0^t \langle db_\tau, U(t, \tau)^*\phi \rangle d\tau \right), \end{aligned}$$

ce qui se réécrit

$$(43) \quad \hat{\mathcal{C}}(t, s, \psi, \phi) = \mathbb{E}(\langle \zeta_0, U(t, 0)^*\psi \rangle \langle \zeta_0, U(s, 0)^*\phi \rangle) + \int_0^s \mathbf{Cov}(\sigma, U(t, \sigma)^*\psi, U(s, \sigma)^*\phi) d\sigma.$$

DÉFINITION 4.2. — *Une solution faible de (42) est un processus gaussien centré dont la covariance vérifie l'identité ci-dessus. (On rappelle en effet que la loi d'un processus gaussien centré est complètement déterminée par sa covariance).*

Dérivons chaque membre de l'identité ci-dessus par rapport à t :

$$\begin{aligned} \partial_t \hat{\mathcal{C}}(t, s, \psi, \phi) &= \mathbb{E}(\langle \zeta_0, U(t, 0)^*\mathcal{L}_t^*\psi \rangle \langle \zeta_0, U(s, 0)^*\phi \rangle) + \int_0^s \mathbf{Cov}(\sigma, U(t, \sigma)^*\mathcal{L}_t^*\psi, U(s, \sigma)^*\phi) d\sigma \\ &= \hat{\mathcal{C}}(t, s, \mathcal{L}_t^*\psi, \phi), \quad t > s. \end{aligned}$$

D'autre part, pour $t = s$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\mathcal{C}}(t, t, \psi, \phi) &= \left(\partial_t \hat{\mathcal{C}}(t, s, \psi, \phi) + \partial_s \hat{\mathcal{C}}(t, s, \psi, \phi) \right) \Big|_{t=s} \\ &= \mathbb{E}(\langle \zeta_0, U(t, 0)^* \mathcal{L}_t^* \psi \rangle \langle \zeta_0, U(t, 0)^* \phi \rangle) \\ &\quad + \int_0^t \mathbf{Cov}(\sigma, U(t, \sigma)^* \mathcal{L}_t^* \psi, U(t, \sigma)^* \phi) d\sigma \\ &\quad + \mathbb{E}(\langle \zeta_0, U(t, 0)^* \psi \rangle \langle \zeta_0, U(t, 0)^* \mathcal{L}_t^* \phi \rangle) \\ &\quad + \int_0^t \mathbf{Cov}(\sigma, U(t, \sigma)^* \psi, U(t, \sigma)^* \mathcal{L}_t^* \phi) d\sigma + \mathbf{Cov}(t, \psi, \phi), \end{aligned}$$

de sorte que

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathcal{C}}(t, t, \psi, \phi) = \hat{\mathcal{C}}(t, t, \mathcal{L}_t^* \psi, \phi) + \hat{\mathcal{C}}(t, t, \psi, \mathcal{L}_t^* \phi) + \mathbf{Cov}(t, \psi, \phi).$$

Évidemment, il s'agit là d'un calcul formel (en toute rigueur, il faudrait revenir à la formulation intégrale en temps équivalente). Toutefois, nous allons, dans la section suivante, faire le lien entre ces formules et la solution de l'équation de Hamilton–Jacobi fonctionnelle (30).

Avant cela, on va modifier très légèrement le calcul ci-dessus de façon à absorber la dérivée en temps le long des caractéristiques de l'opérateur d'advection $v \cdot \nabla_x$. Rappelons la notation $A_t = e^{-tv \cdot \nabla_x}$, c'est-à-dire que $A_t \phi(x, v) = \phi(x - tv, v)$.

Comme $(\phi, \psi) \mapsto \hat{\mathcal{C}}(t, s, \psi, \phi)$ est une forme bilinéaire, on calcule facilement

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\mathcal{C}}(t, t, A_t \psi, A_t \phi) &= \hat{\mathcal{C}}(t, t, \mathcal{L}_t^* A_t \psi, A_t \phi) + \hat{\mathcal{C}}(t, t, A_t \psi, \mathcal{L}_t^* A_t \phi) + \mathbf{Cov}(t, A_t \psi, A_t \phi) \\ &\quad - \hat{\mathcal{C}}(t, t, v \cdot \nabla_x A_t \psi, A_t \phi) - \hat{\mathcal{C}}(t, t, A_t \psi, v \cdot \nabla_x A_t \phi) \\ &= \hat{\mathcal{C}}(t, t, \mathbf{L}_t^* A_t \psi, A_t \phi) + \hat{\mathcal{C}}(t, t, A_t \psi, \mathbf{L}_t^* A_t \phi) + \mathbf{Cov}(t, A_t \psi, A_t \phi). \end{aligned}$$

D'autre part, pour $t > s$, on a

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\hat{\mathcal{C}}(t, s, A_t \psi, \phi_s) &= \hat{\mathcal{C}}(t, s, \mathcal{L}_t^* A_t \psi, \phi_s) - \hat{\mathcal{C}}(t, s, v \cdot \nabla_x A_t \psi, \phi_s) \\ &= \hat{\mathcal{C}}(t, s, \mathbf{L}_t^* A_t \psi, \phi_s), \end{aligned}$$

de sorte que

$$\hat{\mathcal{C}}(t, s, A_t \psi, \phi_s) = \hat{\mathcal{C}}(s, s, A_s \psi, \phi_s) + \int_s^t \hat{\mathcal{C}}(\sigma, s, \mathbf{L}_\sigma^* A_\sigma \psi, \phi_s) d\sigma,$$

identité dont on intègre ensuite chaque membre par rapport à s , pour aboutir à

$$\int_0^t \hat{\mathcal{C}}(t, s, A_t \psi, \phi_s) ds = \int_0^t \left(\hat{\mathcal{C}}(s, s, A_s \psi, \phi_s) + \int_s^t \hat{\mathcal{C}}(\sigma, s, \mathbf{L}_\sigma^* A_\sigma \psi, \phi_s) d\sigma \right) ds.$$

En remplaçant ψ par $A_{-t} \psi$, on trouve finalement que

$$\int_0^t \hat{\mathcal{C}}(t, s, \psi, \phi_s) ds = \int_0^t \left(\hat{\mathcal{C}}(s, s, A_{s-t} \psi, \phi_s) + \int_s^t \hat{\mathcal{C}}(\sigma, s, \mathbf{L}_\sigma^* A_{\sigma-t} \psi, \phi_s) d\sigma \right) ds.$$

En résumé, la solution ζ_t de (42) est un processus gaussien centré dont la covariance $\hat{\mathcal{C}}(t, s, \psi, \phi)$ est solution du système d'équations intégrales

$$(44) \quad \begin{cases} \hat{\mathcal{C}}(t, t, \psi, \phi) = \hat{\mathcal{C}}(0, 0, A_{-t}\psi, A_{-t}\phi) + \int_0^t \mathbf{Cov}(s, A_{s-t}\psi, A_{s-t}\phi) \\ \quad + \int_0^t \left(\hat{\mathcal{C}}(s, s, \mathbf{L}_s^* A_{s-t}\psi, A_{s-t}\phi) + \hat{\mathcal{C}}(s, s, A_{s-t}\psi, \mathbf{L}_s^* A_{s-t}\phi) \right) ds, \\ \int_0^t \hat{\mathcal{C}}(t, s, \psi, \phi_s) ds = \int_0^t \left(\hat{\mathcal{C}}(s, s, A_{s-t}\psi, \phi_s) + \int_s^t \hat{\mathcal{C}}(\sigma, s, \mathbf{L}_\sigma^* A_{\sigma-t}\psi, \phi_s) d\sigma \right) ds. \end{cases}$$

On y ajoute l'information provenant de la condition initiale :

$$(45) \quad \hat{\mathcal{C}}(0, 0, \psi, \phi) = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \phi(z) \psi(z) f^{in}(z) dz.$$

Or on va voir que l'équation d'Hamilton–Jacobi permet justement de montrer que la limite de la covariance du champ de fluctuation ζ_t^ϵ lorsque $\epsilon \rightarrow 0^+$ vérifie le même système (44) d'équations intégrales que ci-dessus. Ce résultat, que nous allons présenter dans la section suivante, est évidemment une étape fondamentale dans la démonstration du Théorème 4.1.

4.2. Covariance limite

La covariance du champ de fluctuations est définie comme suit : pour toute paire de fonctions test $\phi, \psi \in C_b(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)$, on pose

$$\mathcal{C}_\epsilon(t, s, \psi, \phi) := \mathbb{E}_\epsilon(\langle \zeta_t^\epsilon, \psi \rangle \langle \zeta_s^\epsilon, \phi \rangle), \quad 0 \leq s \leq t.$$

L'équation de Hamilton–Jacobi (30) va nous permettre de caractériser la covariance limite du champ de fluctuations (limite de $\mathcal{C}_\epsilon(t, s, \psi, \phi)$ lorsque $\epsilon \rightarrow 0^+$).

PROPOSITION 4.3. — *Supposons que f^{in} vérifie (17), et soit f la solution du problème de Cauchy (14)–(18) sur $[0, T^*] \times \mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3$ où $T^* \equiv T^*[C_0, \beta_0] > 0$. Pour toute paire de fonctions test $\phi, \psi \in C_b(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)$ et tous $s \leq t$ dans $[0, T_0]$,*

$$\mathcal{C}_\epsilon(t, s, \psi, \phi) \rightarrow \mathcal{C}(t, s, \psi, \phi) \quad \text{lorsque } \epsilon \rightarrow 0^+.$$

De plus, la covariance limite \mathcal{C} est solution du système (44) d'équations intégrales, et vérifie la condition initiale (45).

Démonstration. — Observons pour commencer que

$$\frac{\partial^2 \mathbf{K}(t, g)}{\partial g(t)^2} \Big|_{g=0} \cdot (\psi, \phi) = \mathcal{C}(t, t, \psi, \phi).$$

Partons de (32) ; en dérivant une fois de plus par rapport à $g(t, \cdot)$, il vient

$$\frac{\partial^2 \mathbf{K}(0, g)}{\partial g(t)^2} \Big|_{g=0} \cdot (\psi, \phi) = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} A_{-t}\psi(z) A_{-t}\phi(z) f^{in}(z) dz = \mathcal{C}(0, 0, A_{-t}\psi, A_{-t}\phi).$$

Revenons ensuite à l'identité (33), dont on dérive chaque membre au point $g = 0$ par rapport à $g(t, \cdot)$ dans la direction ψ , pour trouver

$$\begin{aligned} & \frac{\partial^2 \mathbf{K}(t, g)}{\partial g(t)^2} \cdot (\phi, \psi) = \frac{\partial^2 \mathbf{K}(0, g)}{\partial g(t)^2} \cdot (\phi, \psi) \\ & + \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p^2} \left(\frac{\partial \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(s)}, g(s) \right) \cdot \left(\frac{\partial^2 \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(t) \partial g(s)} \cdot (\phi, \cdot), \frac{\partial^2 \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(t) \partial g(s)} \cdot (\psi, \cdot) \right) ds \\ & + \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q \partial p} \left(\frac{\partial \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(s)}, g(s) \right) \cdot \left(A_{s-t} \phi, \frac{\partial^2 \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(t) \partial g(s)} \cdot (\psi, \cdot) \right) ds \\ & + \int_0^t \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \left(\frac{\partial \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(s)}, g(s) \right), \frac{\partial^3 \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(t)^2 \partial g(s)} \cdot (\phi, \psi, \cdot) \right\rangle ds \\ & + \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p \partial q} \left(\frac{\partial \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(s)}, g(s) \right) \cdot \left(\frac{\partial^2 \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(t) \partial g(s)} \cdot (\phi, \cdot), A_{s-t} \psi \right) ds \\ & + \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q^2} \left(\frac{\partial \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(s)}, g(s) \right) \cdot (A_{s-t} \phi, A_{s-t} \psi) ds. \end{aligned}$$

En utilisant la règle de dérivation des fonctions composées et le Lemme 2.8, on a

$$\frac{\partial^2 \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(t) \partial g(s)} \cdot (\psi, \cdot) = \frac{\partial^2 \mathbf{K}(s, g)}{\partial g(s)^2} \cdot (A_{s-t} \psi, \cdot).$$

D'autre part

$$\mathcal{H}(p, 0) = 0, \quad \text{d'où} \quad \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p}(p, 0) = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p^2}(p, 0) = 0,$$

de sorte qu'en faisant $g = 0$ dans l'identité ci-dessus, il vient

$$\begin{aligned} & \mathcal{C}(t, t, \phi, \psi) = \mathcal{C}(0, 0, A_{-t} \phi, A_{-t} \psi) \\ & + \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q \partial p} (f(s, \cdot), 0) \cdot \left(A_{s-t} \phi, \frac{\partial^2 \mathbf{K}(s, 0)}{\partial g(s)^2} \cdot (A_{s-t} \psi, \cdot) \right) ds \\ & + \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p \partial q} (f(s, \cdot), 0) \cdot \left(\frac{\partial^2 \mathbf{K}(s, 0)}{\partial g(s)^2} \cdot (A_{s-t} \phi, \cdot), A_{s-t} \psi \right) ds \\ & + \int_0^t \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q^2} (f(s, \cdot), 0) \cdot (A_{s-t} \phi, A_{s-t} \psi) ds \end{aligned}$$

puisque l'on sait, d'après la Proposition 2.7, que $\frac{\partial \mathbf{K}(s, 0)}{\partial g(s)} = f(s, \cdot)$, où f est la solution de l'équation de Boltzmann (14).

Ensuite, la formule (31) montre que

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial q^2} (f(s, \cdot), 0) \cdot (\Phi, \Psi) &= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} \mathbf{D}\Phi(s, x, v, x, v_*, \omega) \mathbf{D}\Psi(s, x, v, x, v_*, \omega) \\ &\quad \times f(s, x, v) f(s, x, v_*) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega dv dv_* dx = \mathbf{Cov}(s, \Phi, \Psi), \end{aligned}$$

tandis que

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial p \partial q} (f(s, \cdot), 0) \cdot (\Phi, \Psi) \\
&= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} \mathbf{D}\Psi(t, x, v, x, v_*, \omega) (\Phi(s, x, v) f(s, x, v_*) + \Phi(s, x, v_*) f(s, x, v)) \\
& \quad \times ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega dv dv_* dx \\
&= \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} (\Phi(x, v') f(s, x, v'_*) + \Phi(x, v'_*) f(s, x, v') - \Phi(x, v) f(s, x, v_*) \\
& \quad - \Phi(x, v_*) f(s, x, v)) \Psi(x, v) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ d\omega dv dv_* dx \\
&= \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \Psi(x, v) \mathbf{L}_t \Phi(x, v) dv dx = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \Phi(x, v) \mathbf{L}_t^* \Psi(x, v) dv dx.
\end{aligned}$$

Par conséquent

$$\begin{aligned}
\mathcal{C}(t, t, \phi, \psi) &= \mathcal{C}(0, 0, A_{-t}\phi, A_{-t}\psi) + \int_0^t \mathcal{C}(s, s, A_{s-t}\psi, \mathbf{L}_t^*(A_{s-t}\phi)) ds \\
& \quad + \int_0^t \mathcal{C}(s, s, A_{s-t}\phi, \mathbf{L}_t^*(A_{s-t}\psi)) ds + \int_0^t \mathbf{Cov}(s, A_{s-t}\phi, A_{s-t}\psi) ds.
\end{aligned}$$

On vient donc de déduire de l'équation de Hamilton–Jacobi (30) le fait que la limite de $\mathcal{C}_\epsilon(t, t, \cdot, \cdot)$ vérifie la première équation du système (44), tout comme la covariance $\hat{\mathcal{C}}(t, t, \cdot, \cdot)$ de la solution de (42). Que la limite de $\mathcal{C}_\epsilon(t, s, \cdot, \cdot)$ vérifie également la seconde équation du système (44) s'obtient par un calcul analogue, quoiqu'un peu plus long, que nous ne ferons donc pas ici, mais pour lequel nous renvoyons le lecteur à la fin de la preuve de la Proposition 5.5.2 dans (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022d). \square

Comme annoncé plus haut, il suffit maintenant de démontrer l'unicité des solutions de (44) pour en déduire que la corrélation limite \mathcal{C} du champ de fluctuations de la mesure empirique ζ_t^ϵ autour de la solution de l'équation de Boltzmann coïncide avec la corrélation $\hat{\mathcal{C}}$ de la solution de (42).

Après quoi, une fois démontré que ζ_t^ϵ converge en loi vers un champ gaussien centré, on en déduira que ce champ gaussien est précisément la solution ζ_t de (42), puisqu'un champ gaussien centré est caractérisé par sa covariance.

Ces deux étapes bien distinctes de la démonstration du Théorème 4.1 (unicité et convergence vers un champ gaussien centré) ne reposent pas sur l'équation de Hamilton–Jacobi, et nous renvoyons le lecteur intéressé à en connaître les démonstrations aux sections 6.2 et 6.3, chapitre 6 de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022d).

4.3. Formule de Spohn pour la covariance limite

SPOHN (1981) propose encore une autre formule pour la covariance limite $\mathcal{C}(t, s, \psi, \phi)$.

PROPOSITION 4.4. — *Sous les mêmes hypothèses qu'à la Proposition 4.3, et pour tous $0 \leq s \leq t \leq T^*$, l'on a*

$$\begin{aligned} \mathcal{C}(t, s, \psi, \phi) &= \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} U(t, s)^* \psi(z) \phi(z) f(s, z) dz \\ &+ \int_0^t \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^2} R^{1,2}(f(\tau, \cdot), f(\tau, \cdot))(z, z_*) (U(t, \tau)^* \psi)(z) (U(s, \tau)^* \phi)(z_*) dz dz_*, \end{aligned}$$

où $R^{1,2}$ est l'opérateur de recollision, défini comme suit :

$$R^{1,2}(g, g)(z_1, z_2) := \delta_0(x_1 - x_2) \int_{\mathbf{S}^2} (g(z'_1)g(z'_2) - g(z_1)g(z_2)) ((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+ d\omega.$$

Avant de donner la démonstration de cette proposition, expliquons la terminologie d'« opérateur de recollision » désignant $R^{1,2}$. Pour cela, revenons à l'équation de Liouville (10), et écrivons l'équation vérifiée par $\mathbb{F}_{n:2}$. On intègre donc chaque membre de (10) par rapport aux variables z_3, \dots, z_n , pour trouver que

$$\begin{aligned} &(\partial_t + \sum_{i=1}^2 v_i \cdot \nabla_{x_i}) \mathbb{F}_{n:2}(t, z_1, z_2) \\ &= (n-2) \epsilon^2 \mathcal{B}_\epsilon^{1,3}(\mathbb{F}_{n:3})(t, z_1, z_2) + (n-2) \epsilon^2 \mathcal{B}_\epsilon^{2,3}(\mathbb{F}_{n:3})(t, z_1, z_2) \\ &\quad + \mathbb{F}_{n:2}(t, z'_1, z'_2) \Big|_{\text{dist}(x_1, x_2) = \epsilon + 0} ((v_1 - v_2) \cdot n_{12})_+ \delta_0(x_1 - x_2) \\ &\quad - \mathbb{F}_{n:2}(t, z_1, z_2) \Big|_{\text{dist}(x_1, x_2) = \epsilon + 0} ((v_1 - v_2) \cdot n_{12})_- \delta_0(x_1 - x_2). \end{aligned}$$

Les intégrales de collision sur la seconde ligne sont données par

$$\begin{aligned} &\mathcal{B}_\epsilon^{1,3}(\mathbb{F}_{n:2})(t, z_1, z_2) \\ &= \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (\mathbb{F}_{n:3}(t, z'_1, z_2, x_1 - \epsilon\omega, v'_3) - \mathbb{F}_{n:3}(t, z_1, z_2, x_1 + \epsilon\omega, v_3)) ((v_1 - v_3) \cdot \omega)_+ d\omega dv_3, \\ &\mathcal{B}_\epsilon^{2,3}(\mathbb{F}_{n:2})(t, z_1, z_2) \\ &= \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (\mathbb{F}_{n:3}(t, z'_1, z_2, x_2 - \epsilon\omega, v'_3) - \mathbb{F}_{n:3}(t, z_1, z_2, x_2 + \epsilon\omega, v_3)) ((v_1 - v_3) \cdot \omega)_+ d\omega dv_3. \end{aligned}$$

Les deux derniers termes sur les troisièmes et quatrièmes lignes traduisent les collisions entre les molécules n^{os} 1 et 2. Comme ces molécules sont celles que l'on a choisies parmi les n en considérant la marginale à deux corps $F_{n:2}(t, z_1, z_2)$, ces collisions correspondent à des corrélations entre les molécules en question, ce qui semble contredire l'hypothèse de chaos moléculaire de Boltzmann, utilisée pour factoriser

$$\mathbb{F}_{n:2}(t, z'_1, z'_2) \Big|_{\text{dist}(x_1, x_2) = \epsilon + 0} \mathbf{1}_{(v_1 - v_2) \cdot n_{12} > 0} \quad \text{et} \quad \mathbb{F}_{n:2}(t, z_1, z_2) \Big|_{\text{dist}(x_1, x_2) = \epsilon + 0} \mathbf{1}_{(v_1 - v_2) \cdot n_{12} < 0}$$

dans le formalisme canonique utilisé dans (LANFORD, 1975 ; CERCIGNANI, ILLNER et PULVIRENTI, 1994 ; GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et TEXIER, 2013 ; GOLSE, 2014), ou, de façon équivalente, la corrélation F_2^ϵ dans le formalisme grand-canonique utilisé ici, afin d'arriver à l'équation de Boltzmann.

Intégrons donc ces deux derniers termes contre une fonction test $\phi \equiv \phi(t, z_1, z_2)$ et faisons tendre ϵ vers 0 en appliquant l’hypothèse de chaos moléculaire en supposant que $\mathbb{F}_{n:2}$ se factorise en $g(t, \cdot) \otimes g(t, \cdot)$ pour les particules sur le point de collisionner : il vient

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\epsilon^2} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^2} \mathbb{F}_{n:2}(t, z'_1, z'_2) \Big|_{\text{dist}(x_1, x_2) = \epsilon + 0} ((v_1 - v_2) \cdot n_{12})_+ \delta_0(x_1 - x_2) \phi(z_1, z_2) dz_1 dz_2 \\ & \rightarrow \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} g(t, x, v'_1) g(t, x, v'_2) ((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+ \phi(x, v_1, x, v_2) dx dv_1 dv_2 d\omega, \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\epsilon^2} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^2} \mathbb{F}_{n:2}(t, z_1, z_2) \Big|_{\text{dist}(x_1, x_2) = \epsilon + 0} ((v_1 - v_2) \cdot n_{12})_- \delta_0(x_1 - x_2) \phi(z_1, z_2) dz_1 dz_2 \\ & \rightarrow \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} g(t, x, v_1) g(t, x, v_2) ((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+ \phi(x, v_1, x, v_2) dx dv_1 dv_2 d\omega. \end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\epsilon^2} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^2} \mathbb{F}_{n:2}(t, z'_1, z'_2) \Big|_{\text{dist}(x_1, x_2) = \epsilon + 0} ((v_1 - v_2) \cdot n_{12})_+ \delta_0(x_1 - x_2) \phi(z_1, z_2) dz_1 dz_2 \\ & - \frac{1}{\epsilon^2} \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^2} \mathbb{F}_{n:2}(t, z_1, z_2) \Big|_{\text{dist}(x_1, x_2) = \epsilon + 0} ((v_1 - v_2) \cdot n_{12})_- \delta_0(x_1 - x_2) \phi(z_1, z_2) dz_1 dz_2 \\ & \rightarrow \int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^2} R^{1,2}(g, g)(t, z_1, z_2) \phi(z_1, z_2) dz_1 dz_2, \end{aligned}$$

ce qui montre le lien entre les recollisions des molécules n^{os} 1 et 2 et l’opérateur $R^{1,2}$.

La formule de Spohn dans la proposition ci-dessus est donc particulièrement intéressante car elle met en évidence la contribution des recollisions, qui sont des événements rares (noter qu’on a dû diviser leur contribution par ϵ^2 pour les mettre à une échelle observable dans la limite de Boltzmann–Grad), à la covariance limite. Quoique rares, ces recollisions ont un effet sur l’instabilité de la dynamique et sur les fluctuations, puisqu’elles correspondent à des collisions entre des sphères de rayon négligeable — rappelons que dans la dynamique du billard, plus le rayon des molécules est petit, plus grande est l’instabilité de la dynamique.

Démonstration de la Proposition 4.4. — On va se limiter au cas où $s = t$ — le cas $s < t$ se traitant de façon analogue. La formule est évidemment correcte pour $t = s = 0$, puisqu’on sait que

$$\mathcal{C}(0, 0, \phi, \psi) = \mathbb{E}(\langle \zeta_0, \phi \rangle \langle \zeta_0, \psi \rangle) = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \phi(z) \psi(z) f^{in}(z) dz.$$

Considérons l’opérateur

$$\begin{aligned} \Sigma_t \psi(z_1) & := -\delta_0(x_1 - x_2) \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3} (f(t, z_1) f(t, z_2) + f(t, z'_1) f(t, z'_2)) \mathbf{D} \psi(z_1, z_2, \omega) \\ & \quad \times ((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+ dz_1 d\omega. \end{aligned}$$

LEMME 4.5. — L’opérateur Σ_t représente la covariance du bruit $\mathbf{Cov}(t, \cdot, \cdot)$, au sens où

$$\mathbf{Cov}(t, \phi, \psi) = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \phi(z) \Sigma_t \psi(z) dz.$$

Cet opérateur vérifie

$$\begin{aligned}\Sigma_t \phi(z) &= - (f(t, \cdot) \mathcal{L}_t^* + \mathcal{L}_t f(t, \cdot)) \phi(z) + \phi(z) \partial_t f(t, z) \\ &\quad + \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} R^{1,2}(f(t, \cdot), f(t, \cdot))(z, z_*) \phi(z_*) dz_*.\end{aligned}$$

Admettons ce lemme, dont la démonstration résulte d'un calcul élémentaire laissé au lecteur. On part de la formule (43) avec $s = t$, soit

$$\mathcal{C}(t, t, \phi, \psi) = \mathbb{E}(\langle \zeta_0, U(t, 0)^* \phi \rangle \langle \zeta_0, U(t, 0)^* \psi \rangle) + \int_0^t \mathbf{Cov}(\tau, U(t, \tau)^* \phi, U(t, \tau)^* \psi) d\tau,$$

formule que l'on transforme comme suit :

$$\begin{aligned}\mathcal{C}(t, t, \phi, \psi) &= \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} U(t, 0)^* \phi(z) U(t, 0)^* \psi(z) f^{in}(z) dz \\ &\quad + \int_0^t \left(\int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \phi(z) U(t, \tau) \Sigma_t U(t, \tau)^* \psi(z) dz \right) d\tau.\end{aligned}$$

Utilisons maintenant la deuxième formule du lemme, que l'on écrit sous la forme

$$\begin{aligned}U(t, \tau) \Sigma_t U(t, \tau)^* \psi(z) &= \partial_\tau (U(t, \tau) f(\tau, \cdot) U(t, \tau)^*) \psi(z) \\ &\quad + U(t, \tau) \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} R^{1,2}(f(t, \cdot), f(t, \cdot))(z, z_*) U(t, \tau)^* \phi(z_*) dz_*,\end{aligned}$$

d'où l'on tire que

$$\begin{aligned}\mathcal{C}(t, t, \phi, \psi) &= \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} U(t, 0)^* \phi(z) U(t, 0)^* \psi(z) f^{in}(z) dz \\ &\quad + \int_0^t \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \phi(z) \partial_\tau (U(t, \tau) f(\tau, \cdot) U(t, \tau)^*) \psi(z) dz d\tau \\ &\quad + \int_0^t \left(\int_{(\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^2} (U(t, \tau)^* \phi)(z) R^{1,2}(f(t, \cdot), f(t, \cdot))(z, z_*) (U(t, \tau)^* \psi)(z_*) dz \right) d\tau.\end{aligned}$$

Par intégration en τ , la seconde intégrale au membre de droite se combine avec le premier terme au membre de droite pour donner ce qui est bien la formule annoncée dans le cas $s = t$. \square

5. ESQUISSE DE PREUVE POUR LE THÉORÈME 2.6

On se limitera dans cette section à quelques trop brèves indications. On espère qu'elles inciteront les lecteurs à étudier en détail (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022d), et leur serviront de guide de lecture.

Une première remarque s'impose : comme pour la preuve du théorème de Lanford, la démonstration du Théorème 2.6 passe par une représentation « assez explicite » des cumulants de tous ordres, plutôt que par une analyse des solutions de l'équation (30) — sans même parler d'un passage à la limite pour $\epsilon \rightarrow 0^+$ dans (27) pour en déduire l'équation (28).

5.1. Représentation des corrélations

Commençons par la solution de l'équation de Boltzmann (14)

$$(\partial_t + v_1 \cdot \nabla_{x_1})F_1(t, z_1) = \mathcal{B}_+(F_1)(t, z_1) - \mathcal{B}_-(F_1)(t, z_1),$$

où l'intégrale des collisions est décomposée en termes de perte \mathcal{B}_- et de gain \mathcal{B}_+ :

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_-(F_1)(t, z_1) &= F_1(t, x_1, v_1) \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} F_1(t, x_1, v_2) ((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+ dv_2 d\omega, \\ \mathcal{B}_+(F_1)(t, z_1) &= \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} F_1(t, x_1, v'_1) F_1(t, x_1, v'_2) ((v_1 - v_2) \cdot \omega)_+ dv_2 d\omega, \end{aligned}$$

avec

$$v'_1 = v_1 - ((v_1 - v_2) \cdot \omega)\omega, \quad v'_2 = v_2 + ((v_1 - v_2) \cdot \omega)\omega.$$

On exprime ensuite F_1 par la formule de Duhamel

$$\begin{aligned} F_1(t, z_1) &= F_1(0, x_1 - tv_1, v_1) + \int_0^t \mathcal{B}_+(F_1)(t-s, x-sv_1, v_1) ds \\ &\quad - \int_0^t \mathcal{B}_-(F_1)(t-s, x-sv_1, v_1) ds, \end{aligned}$$

puis l'on itère cette formule en exprimant à nouveau F_1 par cette même formule dans les termes de perte \mathcal{B}_- et de gain \mathcal{B}_+ . On aboutit ainsi à représenter F_1 par une série de la forme

$$(46) \quad F_1(t, z_1) = \sum_{n \geq 0} \sum_{\mathbb{A}_{1,n}} \int_{([0, t_1] \times \mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2)^{n-1}} (f^{in})^{\otimes n}(\Psi_{1,n}(0)) S(\Psi_{1,n}) dT_{2,n} dV_{2,n} d\Omega_{2,n},$$

où $V_{2,n} := (v_2, \dots, v_n)$, avec des définitions similaires de $\Omega_{2,n}$ et de $T_{2,n}$, à ceci près que l'on suppose en plus $0 < t_n < t_{n-1} < \dots < t_2 < t_1$. Chaque terme dans cette série est représenté par un arbre⁽⁸⁾ $\mathbb{A}_{1,n}$ enraciné⁽⁹⁾ en 1 avec $n-1$ points de ramification $a_i \in \{2, \dots, n\}$ correspondant à des instants de collision $t_2 > \dots > t_n > 0$ pour $i = 2, \dots, n$, comme sur la figure 5.1. La pseudo-trajectoire $\Psi_{1,n}$ est définie par la règle suivante :

(a) sur $]t_i, t_{i-1}[$, on fait évoluer un groupe de $i-1$ particules par la dynamique du transport libre $Z_{i-1} \mapsto (X_{i-1} - (t_{i-1} - t)V_{i-1}, V_{i-1})$;

(b) au temps t_i , on ajoute la particule n° i à la position $x_{a_i}(t_i)$ avec la vitesse v_i ;

(c) si $v_{a_i}(t_i + 0) - v_i \cdot \omega_i > 0$, on effectue la collision en remplaçant $(v_{a_i}(t_i + 0), v_i)$ par $(v'_{a_i}(t_i + 0), v'_i)$ au moyen des relations de collision paramétrées par ω_i , i.e.

$$(v'_{a_i}(t_i + 0), v'_i) = (v_{a_i}(t_i + 0) - ((v_{a_i}(t_i + 0) - v_i) \cdot \omega_i)\omega_i, v_i + ((v_{a_i}(t_i + 0) - v_i) \cdot \omega_i)\omega_i)$$

et on itère le processus ci-dessus en posant

$$(v_{a_i}(t_i - 0), v_i(t_i - 0)) = (v'_{a_i}(t_i + 0), v'_i);$$

si $(v_{a_i}(t_i + 0) - v_i) \cdot \omega_i > 0$, on poursuit de même sans changer les vitesses $v_{a_i}(t_i + 0)$ et v_i (ce dernier cas correspondant à la contribution des termes de perte \mathcal{B}_-).

8. Pour ce qui est des arbres et des graphes, on utilisera la terminologie de l'annexe du chapitre IV de (BOURBAKI, 1981).

9. C'est-à-dire avec un sommet distingué.

Ces règles définissent ainsi une pseudo-trajectoire $\Psi_n(t)$ issue de z_1 à l'instant t , et dont la valeur à $t = 0$ est $\Psi_n(0) \in (\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3)^n$.

Dans la série ci-dessus, on pose enfin

$$S(\Psi_{1,n}) := \prod_{i=1}^n \pm((v - v_{a_i}(t_i + 0)) \cdot \omega_i)_+,$$

où le préfacteur \pm vaut $+$ en cas de collision avec changement de vitesse, et $-$ dans le cas contraire.

Une représentation analogue existe pour F_1^ϵ avant le passage à la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$:

$$(47) \quad F_1^\epsilon(t, z_1) = \sum_{n \geq 0} \sum_{\mathbb{G}_{1,n}} \int_{\mathcal{E}^\epsilon} F_n^\epsilon(\Psi_{1,n}^\epsilon(0)) S^\epsilon(\Psi_{1,n}) dT_{2,n} dV_{2,n} d\Omega_{2,n}.$$

Les différences avec le calcul de F_1 sont les suivantes :

(a') sur $]t_i, t_{i-1}[$, on fait évoluer un groupe de $i - 1$ particules par la dynamique du billard à $i - 1$ corps (1)-(2)-(3), au lieu du transport libre ; il y a donc en général des recollisions, comme expliqué dans la section précédente, de sorte que cette représentation est paramétrée par un graphe $\mathbb{G}_{1,n}$ pouvant présenter des circuits (chaque recollision créant un circuit : voir figure 5.1), et non plus par un arbre ;

(b') au temps t_i , on ajoute la particule n° i à la position $x_{a_i}(t_i) + \epsilon \omega_i$ au lieu de $x_{a_i}(t_i)$ avec la vitesse v_i ;

(c') on intègre sur les paramètres admissibles \mathcal{E}^ϵ au lieu de $([0, t_1] \times \mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2)^{n-1}$ avec la seule contrainte $0 < t_n < \dots < t_2 < t_1$, car les particules ne doivent se recouvrir à aucun instant. En particulier $\Psi_n^\epsilon(0) \in \Gamma_n^\epsilon$.

Évidemment, il existe une représentation analogue à (47) pour les corrélations d'ordre supérieur F_k^ϵ . Au lieu d'un seul arbre, elle met en jeu k graphes de sommets marqués $1, 2, \dots, k$, avec n_1, \dots, n_k arêtes, et ces graphes peuvent bien sûr interagir.

5.2. Représentation des cumulants

Examinons le cas du second cumulant $f_2^\epsilon := \mu_\epsilon(F_2^\epsilon - F_1^\epsilon \otimes F_1^\epsilon)$. Comme expliqué plus haut, la représentation de F_2^ϵ met en jeu deux graphes avec chacun un sommet marqué, notés 1 et 2. Deux cas se présentent alors : (i) ces deux graphes sont disconnectés, c'est-à-dire restent à une distance supérieure à ϵ sur l'intervalle de temps $[0, t]$, (ii) à un (ou plusieurs) instants dans l'intervalle de temps $[0, t]$, ces deux graphes subissent une recollision *externe*, mettant en jeu une arête de chacun des deux graphes.

Les graphes disconnectés ne sont pas indépendants, car ils sont corrélés par la relation d'exclusion (le fait d'être à distance supérieure à ϵ sur $[0, t]$). De même que, d'après (6)

$$\mathbb{F}_2^{in}(z_1, z_2) = f^{in} \otimes f^{in}(z_1, z_2) - f^{in}(z_1) f^{in}(z_2) \mathbf{1}_{|x_1 - x_2| \leq \epsilon},$$

(où on peut penser aux points z_1 et z_2 comme à deux arbres triviaux à un seul sommet), on peut représenter la contribution des graphes disconnectés comme différence entre le carré tensoriel de F_1^ϵ et celle où les deux graphes de sommets marqués 1 et 2 se trouvent à une distance inférieure à ϵ à un (ou plusieurs) instants dans l'intervalle de temps $[0, t]$ sans transformation de vitesse, situation qu'on désigne du nom de « recouvrement ».

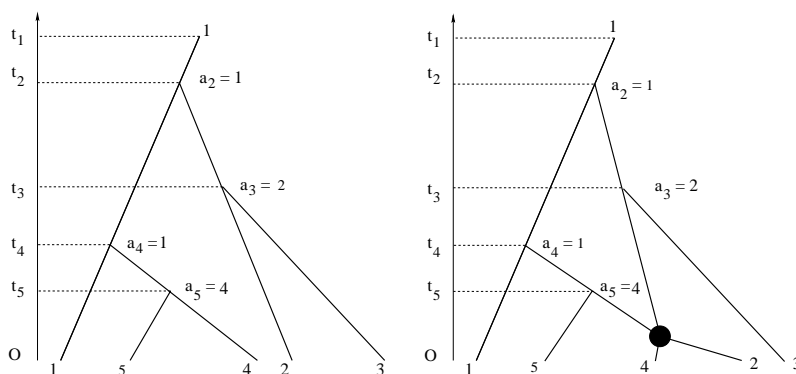


FIGURE 2. À gauche un arbre de type $\mathbb{A}_{1,5}$ à 5 molécules correspondant à la dynamique de l'équation de Boltzmann. À droite, un graphe de type $\mathbb{G}_{1,5}$ à 5 molécules correspondant à la dynamique (1)-(2)-(3). L'intersection signalée par un disque noir désigne une « recollision » entre les molécules n^{os} 2 et 4 avant que celles-ci n'entrent en collision avec la molécule n^o1. Lorsqu'à l'instant $t_4 - 0$ la particule n^o4 est ajoutée aux particules n^{os} 1, 2, 3, elle n'en est pas indépendante car elle a déjà subi une collision avec la molécule n^o2 auparavant (dans le cas présent, avant l'instant t_5). Le triangle de sommets les points de ramification a_2, a_4 et le disque noir correspondant à la recollision entre molécules n^{os} 2 et 4 est un circuit dans le graphe $\mathbb{G}_{1,5}$.

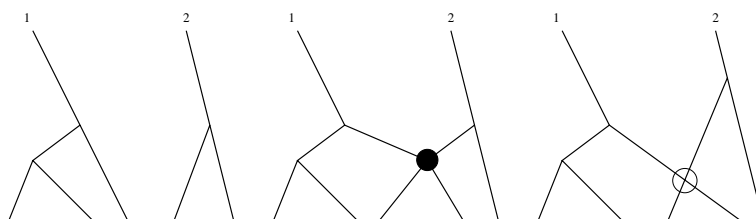


FIGURE 3. À gauche les arbres (1) et (2) sont disconnectés, ce qu'on note $(1) \not\sim (2)$; au milieu, les arbres (1) et (2) subissent une recollision externe (disque noir), ce qu'on note $(1) \sim_r (2)$; enfin, à droite, les arbres (1) et (2) sont en situation de recouvrement (cercle), ce qu'on note $(1) \sim_o (2)$.

À partir de là, on arrive à une représentation du second cumulant de la forme

$$f_2^\epsilon = \mu_\epsilon (F_2^\epsilon - F_1^\epsilon \otimes F_1^\epsilon)$$

$$= \mu_\epsilon \sum_{(1) \sim_r (2)} \text{[Diagram with black dot]} - \mu_\epsilon \sum_{(1) \sim_o (2)} \text{[Diagram with circle]}$$

+ terme obtenu par propagation du second cumulant à $t = 0$

(voir dans la section 4.4.2 de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022d) la formule suivant (4.4.1), ou encore la figure 10 de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022a), où le terme provenant de la condition initiale n'est pas mentionné, comme expliqué dans la Remarque 3.1 de cette dernière référence).

Partons de z_1, z_2 à l'instant t tels que $|(x_1 - x_2) - (t - s)(v_1 - v_2)| \leq \epsilon$ pour au moins une valeur de $s \in [0, t]$, et considérons le cas très particulier de deux arbres sans point de ramification (autrement dit sans collisions entre $[0, t]$). La contribution d'un tel terme à $F_2^\epsilon - F_1^\epsilon \otimes F_1^\epsilon$ sera génériquement d'ordre 1 en norme L^∞ (sauf évidemment dans le cas d'une maxwellienne, où les termes de perte et de gain se compensent exactement pour chaque vecteur unitaire ω dans la loi de collision (16)). Ce qu'on donc peut espérer, dans le meilleur des cas, est que $F_2^\epsilon - F_1^\epsilon \otimes F_1^\epsilon$ soit petit en variation totale, comme terme d'ordre un intégré sur un ensemble de mesure petite — dans ce cas précis très particulier, sur un cylindre de section $\pi\epsilon^2 \times t|v_1 - v_2|$. Ceci justifie heuristiquement la mise à l'échelle de $F_2^\epsilon - F_1^\epsilon \otimes F_1^\epsilon$, que l'on doit multiplier par μ_ϵ pour compenser l'évanescence de ce terme dans la limite de Boltzmann–Grad.

Ces remarques très fragmentaires donnent un aperçu de comment calculer et estimer le cumulants d'ordre 2. On comprend qu'il existe une représentation analogue pour les cumulants d'ordre quelconque. En gros, les contributions au cumulants d'ordre k sont d'ordre μ_ϵ^{k-1} (provenant de la mise à l'échelle dans la définition (24) de f_k^ϵ), multiplié par le nombre de graphes sur lesquels on doit sommer, terme que l'on multiplie à son tour par $O((\epsilon^2 \times t(|v_1| + \dots + |v_k|))^{k-1})$, qui est la mesure du domaine d'intégration, multipliée par la taille de la fonction à intégrer, pour laquelle on utilise la décroissance gaussienne de la condition initiale, afin de compenser la contribution de la norme des vitesses relatives à la taille du domaine d'intégration. Quant au nombre de graphes sur lesquels sommer, on se ramène à k^{k-2} (nombre d'arbres non orientés à k sommets étiquetés, d'après la formule de Cayley — cf. (AIGNER et ZIEGLER, 2010), chapitre 30), multiplié par 2^{k-1} (correspondant au choix d'un signe \pm à chaque sommet excepté la racine). Ce raisonnement conduit à la formule (3.4) de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022a).

Le lecteur intéressé à connaître le détail de ces calculs et des estimations qui en découlent est invité à lire les chapitres 3 et 4 de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022d), qui précisent les formules évoquées ci-dessus de représentation des cumulants de tous ordres en termes de graphes, ainsi que le chapitre 8, pour la démonstration des bornes sur les cumulants de tous ordres (contenant le résultat énoncé plus haut comme Proposition 2.4). La limite en $\epsilon \rightarrow 0^+$ conduisant à la fonction $\mathbf{K}(t, h)$ et au Théorème 2.6 est traitée dans le chapitre 9 de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022d).

6. ÉPILOGUE : PAR-DELÀ LE TEMPS DE LANFORD

Tous les résultats dont il a été question jusqu'ici dans cet exposé portaient sur des intervalles de temps courts (de l'ordre du « temps de Lanford », c'est-à-dire de $T_0 = T_0[C_0, \beta_0]$ dans l'énoncé du Théorème 1.5). Rappelons que cette restriction avait été annoncée dans le troisième paragraphe de la section 2. Mais la dernière phrase de ce paragraphe faisait également espérer que l'on puisse également obtenir des informations sur la limite de Boltzmann–Grad après le temps de Lanford.

Rappelons que BODINEAU, GALLAGHER et SAINT-RAYMOND (2016) ont réussi à pousser la limite de Boltzmann–Grad par-delà le temps de Lanford dans des régimes particuliers (conduisant à l'équation de Boltzmann linéaire puis à une asymptotique de diffusion, ou au voisinage d'un équilibre maxwellien, puis dans une limite hydrodynamique conduisant aux équations de Stokes dépendant du temps (BODINEAU, GALLAGHER et SAINT-RAYMOND, 2017)). Sur le premier de ces deux résultats, on pourra consulter également (GOLSE, 2014).

L'idée de pousser l'analyse des fluctuations de la mesure empirique autour de la solution de l'équation de Boltzmann s'impose alors comme particulièrement naturelle. On peut en effet espérer que ce cadre particulier offre la possibilité de justifier une équation aux fluctuations sur des plages de temps tendant vers l'infini avec $1/\epsilon$. Voici le théorème obtenu par BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA (2020b, 2022c) dans cette direction (Théorème 4.1 de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022a)).

Notons $M(v) := \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-|v|^2/2}$ la maxwellienne de densité 1, de vitesse moyenne nulle et de température 1, autrement dit la gaussienne centrée réduite. Notons également

$$\begin{aligned} \mathbf{L}_M \phi(t, x, v) &:= \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (M(v') \phi(t, x, v_*) + M(v_*) \phi(t, x, v') \\ &\quad - M(v) \phi(t, x, v_*) - M(v_*) \phi(t, x, v)) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ dv_* d\omega, \\ \mathbf{L}_M^* \phi(t, x, v) &:= \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (\phi(t, x, v') + \phi(t, x, v)) \\ &\quad - \phi(t, x, v_*) - \phi(t, x, v)) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ M(v_*) dv_* d\omega, \end{aligned}$$

les intégrales de collision directe et adjointe linéarisées autour de M .

THÉORÈME 6.1. — *Supposons que $f^{in} = M$. Dans la limite de Boltzmann–Grad $\mu_\epsilon = \epsilon^{-2}$ pour le formalisme grand-canonique, le champ de fluctuations ζ_t^ϵ de (21) converge en loi sur tout intervalle de temps de la forme $[0, T_\epsilon]$ avec $T_\epsilon = O(\ln \ln \ln \mu_\epsilon)$ vers le processus gaussien centré solution de l'équation de Boltzmann aux fluctuations*

$$d\zeta_t = (-v \cdot \nabla_x + \mathbf{L}_M) \zeta_t^\epsilon + db_t,$$

où b_t est un bruit gaussien delta-corrélé en t, x , de covariance

$$\begin{aligned} \mathbf{Cov}(t, \phi, \psi) &:= \frac{1}{2} \int_{\mathbf{T}^3 \times (\mathbf{R}^3)^2 \times \mathbf{S}^2} \mathbf{D}\phi(x, v, x, v_*, \omega) \mathbf{D}\psi(x, v, x, v_*, \omega) \\ &\quad \times M(v) M(v_*) ((v - v_*) \cdot \omega)_+ dx dv dv_* d\omega, \end{aligned}$$

et où ζ_0 est le champ gaussien centré de covariance

$$\mathbf{E}(\langle \zeta_0, \phi \rangle \langle \zeta_0, \psi \rangle) = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} \phi(z) \psi(z) M(v) dz .$$

On laissera de côté la démonstration de ce dernier résultat. Ce qui en est dit dans la section 4.3 de (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022a) fait comprendre qu'elle est particulièrement complexe. Signalons la formule suivante pour la covariance dans ce cas :

$$\mathcal{C}(t, 0, h, g^{in}) = \int_{\mathbf{T}^3 \times \mathbf{R}^3} g(t, x, v) h(x, v) M(v) dx dv ,$$

où $g(t, \cdot) = e^{t(-v \cdot \nabla_x + \mathbf{L}_M^*)} g^{in}$. Cette formule se déduit facilement de celle de Spohn (Proposition 4.4), au moins sur le laps de temps bref (de l'ordre du temps de Lanford) sur lequel elle a été établie jusqu'ici. Il suffit en effet d'utiliser l'identité immédiate $M \mathbf{L}_M^*(g) = L_M(Mg)$, et d'observer que $R^{1,2}(M, M) = 0$.

Enfin, comme la longueur de l'intervalle de temps sur lequel l'équation de Boltzmann aux fluctuations autour de l'équilibre maxwellien est établie tend vers l'infini avec $1/\epsilon$, on peut également étudier ces fluctuations dans un régime hydrodynamique convenablement linéarisé, pour obtenir un système de Stokes-Fourier aux fluctuations — sur ce dernier point, voir l'article très récent (BODINEAU, GALLAGHER, SAINT-RAYMOND et SIMONELLA, 2022b).

RÉFÉRENCES

- Martin AIGNER et Günter M. ZIEGLER (2010). *Proofs from The Book*. Fourth edition. Springer-Verlag, Berlin, p. viii+274.
- Roger ALEXANDER (1976). « Time evolution for infinitely many hard spheres », *Comm. Math. Phys.* **49** (3), p. 217-232.
- Nathalie AYI (2017). « From Newton's law to the linear Boltzmann equation without cut-off », *Comm. Math. Phys.* **350** (3), p. 1219-1274.
- Patrick BILLINGSLEY (1999). *Convergence of probability measures*. Second edition. Wiley Series in Probability and Statistics : Probability and Statistics. A Wiley-Interscience Publication. John Wiley & Sons, Inc., New York, p. x+277.
- Thierry BODINEAU, Isabelle GALLAGHER et Laure SAINT-RAYMOND (2016). « The Brownian motion as the limit of a deterministic system of hard-spheres », *Invent. Math.* **203** (2), p. 493-553.
- (2017). « From hard sphere dynamics to the Stokes-Fourier equations : an L^2 analysis of the Boltzmann-Grad limit », *Ann. PDE* **3** (1), Paper No. 2, 118.
- Thierry BODINEAU, Isabelle GALLAGHER, Laure SAINT-RAYMOND et Sergio SIMONELLA (2018). « One-sided convergence in the Boltzmann-Grad limit », *Ann. Fac. Sci. Toulouse Math. (6)* **27** (5), p. 985-1022.

- Thierry BODINEAU, Isabelle GALLAGHER, Laure SAINT-RAYMOND et Sergio SIMONELLA (2020a). « Fluctuation theory in the Boltzmann-Grad limit », *J. Stat. Phys.* **180** (1-6), p. 873-895.
- (2020b). « Long-time correlations for a hard sphere gas at equilibrium », *arXiv :2012.03813 [math.AP]*, to appear in *Comm. on Pure and Appl. Math.*
- (2022a). « Dynamics of Dilute Gases : A Statistical Approach », *prépublication arXiv :2201.10149v2 [math.AP]*.
- (2022b). « Dynamics of Dilute Gases at Equilibrium : From the Atomistic Description to Fluctuating Hydrodynamics », *arXiv 2210 :11812 [math.AP]*.
- (2022c). « Long-time derivation at equilibrium of the fluctuating Boltzmann equation », *arXiv :2201.04514 [math.AP]*.
- (2022d). « Statistical Dynamics of a Hard Sphere Gas : Fluctuating Boltzmann Equation and Large Deviations », *arXiv :2008.10403v2 [math.AP]*.
- Ludwig BOLTZMANN (1872). « Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen », *Sitzungsberichte der Kaiserliche Akad. Wissenschafte* **66**, p. 275-370.
- (1964). *Lectures on gas theory*. Translated by Stephen G. Brush. University of California Press, Berkeley-Los Angeles, Calif., p. ix+490.
- Freddy BOUCHET (2020). « Is the Boltzmann equation reversible? A large deviation perspective on the irreversibility paradox », *J. Stat. Phys.* **181** (2), p. 515-550.
- Nicolas BOURBAKI (1981). *Éléments de mathématique*. Groupes et algèbres de Lie. Chapitres 4, 5 et 6. [Lie groups and Lie algebras. Chapters 4, 5 and 6]. Masson, Paris, p. 290.
- Carlo CERCIGNANI (1972). « On the Boltzmann equation for rigid spheres », *Transport Theory Statist. Phys.* **2** (3), p. 211-225.
- Carlo CERCIGNANI, Reinhard ILLNER et Mario PULVIRENTI (1994). *The mathematical theory of dilute gases*. T. 106. Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, New York, p. viii+347.
- Ronald J. DIPERNA et Pierre-Louis LIONS (1989). « On the Cauchy problem for Boltzmann equations : global existence and weak stability », *Ann. of Math. (2)* **130** (2), p. 321-366.
- Isabelle GALLAGHER, Laure SAINT-RAYMOND et Benjamin TEXIER (2013). *From Newton to Boltzmann : hard spheres and short-range potentials*. Zurich Lectures in Advanced Mathematics. European Mathematical Society (EMS), Zürich, p. xii+137.
- Giovanni GALLAVOTTI (1969). « Divergences and the Approach to Equilibrium in the Lorentz and the Wind-Tree Models », *Phys. Rev.* **185**, p. 308-322.
- Patrick GÉRARD (1988). « Solutions globales du problème de Cauchy pour l'équation de Boltzmann (d'après R. J. DiPerna et P.-L. Lions) », *Astérisque* (161-162). Séminaire Bourbaki, Vol. 1987/88, Exp. No. 699, 5, 257-281 (1989).
- François GOLSE (2014). « De Newton à Boltzmann et Einstein : validation des modèles cinétiques et de diffusion (d'après T. Bodineau, I. Gallagher, L. Saint-Raymond, B.

- Texier) », *Astérisque* (367-368). Séminaire Bourbaki, Vol. 2013/14, Exp. No. 1083, ix, 285-326 (2015).
- Harold GRAD (1949). « On the kinetic theory of rarefied gases », *Comm. Pure Appl. Math.* **2**, p. 331-407.
- (1958). *Principles of the kinetic theory of gases*. Handbuch der Physik, Bd. 12, Thermodynamik der Gase. Herausgegeben von S. Flügge. Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg, p. 205-294.
- David HILBERT (1902). « Mathematical problems », *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)* **8**. (Reprinted in *Bull. Amer. Math. Soc.* **37** (2000), 407-436), p. 437-479.
- Eberhard HOPF (1950). « The partial differential equation $u_t + uu_x = \mu u_{xx}$ », *Comm. Pure Appl. Math.* **3**, p. 201-230.
- Reinhard ILLNER et Mario PULVIRENTI (1989). « Global validity of the Boltzmann equation for two- and three-dimensional rare gas in vacuum. Erratum and improved result : “Global validity of the Boltzmann equation for a two-dimensional rare gas in vacuum” [Comm. Math. Phys. **105** (1986), no. 2, 189–203] and “Global validity of the Boltzmann equation for a three-dimensional rare gas in vacuum” [ibid. **113** (1987), no. 1, 79–85] by Pulvirenti », *Comm. Math. Phys.* **121** (1), p. 143-146.
- Francis KING (1975). « BBGKY hierarchy for positive potentials ». Thèse de doct. Dept of Math., Univ. of California, Berkeley.
- Oscar E. LANFORD III (1975). « Time evolution of large classical systems », in : *Dynamical systems, theory and applications (Rencontres, Battelle Res. Inst., Seattle, Wash., 1974)*. Lecture Notes in Phys., Vol. 38. Springer, Berlin, p. 1-111.
- (1976). « On a derivation of the Boltzmann equation », in : *International Conference on Dynamical Systems in Mathematical Physics (Rennes, 1975)*. Astérisque, No. 40. Soc. Math. France, Paris, p. 117-137.
- Paul MALLIAVIN (1995). *Integration and probability*. T. 157. Graduate Texts in Mathematics. With the collaboration of Hélène Airault, Leslie Kay and Gérard Letac, Edited and translated from the French by Kay, With a foreword by Mark Pinsky. Springer-Verlag, New York, p. xxii+322.
- James Clerk MAXWELL (1860). « Illustrations of the Dynamical Theory of Gases », *Philosophical Magazine* (4) **19**, p. 19-32.
- (1867). « On the Dynamical Theory of Gases », *Philosophical Trans. Roy. Soc. London* **147**, p. 49-88.
- Louis NIRENBERG (1972). « An abstract form of the nonlinear Cauchy-Kowalewski theorem », *J. Differential Geometry* **6**, p. 561-576.
- Lev V. OVSJANNIKOV (1971). « A nonlinear Cauchy problem in a scale of Banach spaces », *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **200**, p. 789-792.
- Mario PULVIRENTI et Sergio SIMONELLA (2017). « The Boltzmann-Grad limit of a hard sphere system : analysis of the correlation error », *Invent. Math.* **207** (3), p. 1135-1237.

- Fraydoun REZAKHANLOU et Cédric VILLANI (2008). *Entropy methods for the Boltzmann equation*. T. 1916. Lecture Notes in Mathematics. Lectures from a Special Semester on Hydrodynamic Limits held at the Université de Paris VI, Paris, 2001, Edited by François Golse and Stefano Olla. Springer, Berlin, p. xii+107.
- Laurent SCHWARTZ (1966). *Théorie des distributions*. Publications de l'Institut de Mathématique de l'Université de Strasbourg, IX-X. Nouvelle édition, entièrement corrigée, refondue et augmentée. Hermann, Paris, p. xiii+420.
- Yoshio SONE (2007). *Molecular gas dynamics*. Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology. Theory, techniques, and applications. Birkhäuser Boston Inc., Boston, MA, p. xiv+658.
- Herbert SPOHN (1981). « Fluctuations around the Boltzmann equation », *J. Statist. Phys.* **26** (2), p. 285-305.
- Henk VAN BEIJEREN, Oscar E. LANFORD III, Joel L. LEBOWITZ et Herbert SPOHN (1980). « Equilibrium time correlation functions in the low-density limit », *J. Statist. Phys.* **22** (2), p. 237-257.
- Sathamangalam R. Srinivasa VARADHAN (1984). *Large deviations and applications*. T. 46. CBMS-NSF Regional Conference Series in Applied Mathematics. Society for Industrial et Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, p. v+75.

François Golse
 École polytechnique, CMLS
 Route de Saclay, 91128 Palaiseau Cedex
E-mail :
 francois.golse@polytechnique.edu