

Annales de la Fondation Louis de Broglie,  
Vol. 8, n° 2, 1983

PROCESSUS LIMITES EN MÉCANIQUE STATISTIQUE  
CLASSIQUE HORS D'ÉQUILIBRE

par Raymond JANCEL

Laboratoire de Physique  
Théorique et Mathématique  
Université Paris VII  
2, Place Jussieu  
75521 Paris Cedex 05

(Séminaire de la Fondation L. de Broglie du 1er Décembre 1980)

---

*L'article que nous commençons ci-dessous, et qui s'étalera, compte tenu de son volume, sur deux livraisons des Annales, est la rédaction d'une conférence que R. Jancel avait faite devant le séminaire de la Fondation L. de Broglie le 1er Décembre 1980. Son exposé constituant une remarquable mise au point des connaissances actuelles sur le sujet (sans parler de l'apport original de l'auteur), nous avons demandé à R. Jancel de nous faire profiter d'une rédaction écrite. Nous tenons à le remercier très vivement pour le travail considérable qu'il s'est imposé pour répondre à nos vœux et, nous en sommes certains, à ceux de nos lecteurs.*

TABLE DES MATIERES

1. Introduction
2. Retour sur les problèmes fondamentaux de la Mécanique statistique à l'équilibre
  - 2.1 Remarques générales
  - 2.2 Ensembles de Gibbs et postulat fondamental de la Mécanique statistique
  - 2.3 Ensembles stationnaires et Mécanique statistique à l'équilibre
  - 2.4 Propriétés ergodiques des systèmes dynamiques
    - a. Théorèmes ergodiques
    - b. Ergodicité et transitivité métrique
    - c. Mixing
    - d. Systèmes dynamiques à propriétés stochastiques  
Théorème de Sinai
  - 2.5 Limite thermodynamique et Thermodynamique statistique
  - 2.6 Limite thermodynamique et théorie du transport au voisinage de l'équilibre
3. Problèmes fondamentaux de la Mécanique statistique hors d'équilibre et description cinétique
  - 3.1 Difficultés et méthodes générales
    - a. Irréversibilité et "coarse-graining"
    - b. Variables macroscopiques et description cinétique
    - c. Descriptions réduites autonomes
    - d. Processus limites
  - 3.2 Hiérarchie B.B.G.K.Y
    - a. Fonctions de distribution réduites
    - b. Différentes formes de la hiérarchie
    - c. La description cinétique au sens de Bogolioubov
    - d. Cas du modèle des sphères dures
  - 3.3 Théorie cinétique des gaz et équation de Boltzmann
    - a. Description cinétique dans l'espace  $\mu$
    - b. Hypothèse du chaos moléculaire et équation de Boltzmann
    - c. Equation de Boltzmann et hiérarchie B.B.G.K.Y
    - d. Hiérarchie de Boltzmann
4. Théorèmes limites en Mécanique statistique hors d'équilibre
  - 4.1 Limite de Boltzmann-Grad et théorème de Lanford
  - 4.2 Limite du couplage faible. Cas du gaz de Lorentz
    - a. Considérations générales
    - b. Modèle de Lorentz

- 4.3 Limite du champ moyen et équation de Vlasov
- 4.4 Remarques sur les fluctuations
5. Conclusion

Bibliographie

## 1. Introduction

Nous nous proposons de donner dans cet article un aperçu d'ensemble sur l'état actuel des recherches portant sur la déduction de résultats rigoureux en Mécanique statistique hors d'équilibre (MSHE), en nous limitant au cas des systèmes classiques. Afin de préciser l'intérêt et la signification exacte de tels résultats, il est nécessaire de les situer dans le contexte des problèmes fondamentaux posés par la Mécanique statistique. On sait en effet que, malgré des succès pratiques considérables, cette discipline soulève d'importants problèmes conceptuels qui sont encore loin d'avoir reçu des solutions définitives. Dès les débuts de la Mécanique statistique, se sont posées des questions de principe telles que :

- Peut-on justifier le postulat fondamental de la théorie, d'après lequel les grandeurs macroscopiques effectivement observées sont définies par des moyennes statistiques prises sur des ensembles de systèmes (ensembles de Gibbs) convenablement choisis ?

- Comment concilier l'irréversibilité et la dissipativité des phénomènes macroscopiques avec la réversibilité et le caractère généralement conservatif des modèles microscopiques ?

- Comment déduire les équations décrivant l'évolution macroscopique d'un système physique à partir d'un modèle dynamique microscopique ? En particulier, peut-on décrire le retour à l'équilibre d'un système isolé ?

Pour tenter de répondre à de telles questions, on peut se fonder soit sur le contenu dynamique soit sur le contenu statistique de la théorie, ce qui conduit à distinguer deux démarches bien distinctes. Dans l'une, d'inspiration mécaniste, on cherche à s'appuyer sur les propriétés globales des trajectoires (ou des ensembles de trajectoires) dynamiques dans l'espace des phases, en considérant l'évolution du système sur de très longues durées  $T$  (avec  $T \rightarrow \infty$ ) : c'est le domaine de la théorie ergodique. Dans l'autre, de nature essentiellement probabiliste, on développe des arguments fondés sur le très grand nombre ( $N$ ) de degrés de liberté des systèmes étudiés, en vue d'éliminer, comme "hautement improbables", les évolutions contraires à l'observation macroscopique ; dans ce

cas, on est donc intéressé en premier lieu par les propriétés du système à la limite  $N \rightarrow \infty$ .

Ces deux démarches se sont révélées également fructueuses et ont donné lieu, entre autres, à l'élaboration de la théorie ergodique moderne et aux travaux fondamentaux de Khintchine. Or, depuis les années 60, l'état de ce sujet s'est trouvé renouvelé à la suite des importants développements qui sont intervenus dans divers domaines, parmi lesquels il convient surtout de citer : (i) les progrès de la théorie générale des systèmes dynamiques classiques, marqués notamment par le théorème de Sinai et la preuve de l'existence de systèmes déterministes à caractères fortement stochastiques (systèmes de Bernoulli,  $K$ -systèmes, ...); (ii) l'établissement d'un ensemble de résultats rigoureux en Mécanique statistique à l'équilibre (MSE), fondés sur la notion centrale de limite thermodynamique ; (iii) l'étude de certains modèles de systèmes infinis ; (iv) la démonstration de quelques théorèmes limites en MSHE. En raison de l'abondance et de la diversité de ces résultats, il apparaît donc utile d'en préciser la signification du point de vue des fondements de la Mécanique statistique et de faire le point sur ce qui peut être actuellement considéré comme bien établi.

Dans cette perspective, l'argument central développé dans cet article est qu'il est nécessaire de recourir à des passages à la limite où  $N \rightarrow \infty$  si l'on veut établir les méthodes de la Mécanique statistique sur une base rigoureuse. On peut montrer notamment que, si  $N$  reste *fini*, les propriétés d'ergodicité et même de mixing sont à elles seules insuffisantes pour rendre compte du comportement dissipatif des systèmes macroscopiques (cf. section 2.6).

Il s'ensuit que la théorie ergodique, malgré ses remarquables succès, ne peut servir de fondement à la Mécanique statistique si l'on ne tient pas compte en même temps du très grand nombre de degrés de liberté du système. On est ainsi conduit, pour traiter les problèmes fondamentaux de la Mécanique statistique, à utiliser des arguments relevant de chacune des deux démarches mentionnées ci-dessus, en s'appuyant à la fois sur les propriétés dynamiques du système et sur son comportement à la limite  $N \rightarrow \infty$ .

La difficulté est alors de déterminer avec précision quel est le rôle respectif de la dynamique et des propriétés statistiques dans la formulation des lois macroscopiques. Dans l'état actuel de nos connaissances, la situation est à cet égard beaucoup plus satisfaisante pour les systèmes à l'équilibre que pour les systèmes hors d'équilibre. Dans le cas de l'équilibre en effet, on dispose maintenant d'un ensemble de résultats concernant l'existence et les propriétés de la limite thermodynamique qui ont été obtenus durant les années 60. Ils permettent d'établir le statut de la MSE sur une base mathématique rigoureuse, où se trouvent clairement distingué ce qui revient à la dynamique et à la statistique. D'une part, les propriétés d'ergodicité et de mixing apparaissent comme nécessaires pour justifier la description d'un système macroscopique à l'équilibre par des valeurs moyennes calculées sur les ensembles statistiques de l'équilibre (micro-canonique, canonique, ...); d'autre part, le passage à la limite thermodynamique joue un rôle essentiel dans l'identification de ces valeurs moyennes aux grandeurs effectivement observées à l'échelle macroscopique (grandeurs thermodynamiques).

Il n'en est pas de même en MSHE où l'on ne disposait, jusqu'au début des années 70, d'aucun résultat rigoureux qui permette de justifier les méthodes mises en oeuvre dans cette discipline. Les difficultés tiennent évidemment au fait que l'on s'intéresse dans ce cas à la description de l'état local et de l'évolution instantanée du système, et non plus seulement aux propriétés globales des ensembles de trajectoires comme dans le cas de l'équilibre. D'une part, il faut d'abord définir quelles sont les grandeurs locales accessibles à la mesure macroscopique. D'autre part, comme l'évolution résulte de la superposition d'un très grand nombre d'interactions élémentaires, on est conduit à faire des hypothèses de nature statistique où se trouvent impliqués, à chaque instant, les effets conjugués de la statistique et des lois dynamiques déterministes. On se trouve de ce fait confronté à deux groupes de problèmes qui jouent un rôle central dans l'élaboration du statut de la MSHE, à savoir : (i) l'existence d'une certaine ambiguïté dans la définition des grandeurs effectivement observées au cours de l'évolution d'un système à N-corps ; (ii) la contradiction, au moins apparente, entre l'irréversibi-

bilité constatée à l'échelle macroscopique et les propriétés de réversibilité et de récurrence des systèmes dynamiques hamiltoniens.

Quel que soit le point de vue adopté à l'égard de ces problèmes, les méthodes habituellement utilisées ont toutes en commun d'être fondées sur la notion de "description réduite" (par rapport à la description dynamique maximale) de l'état du système, la "réduction" du nombre de variables étant définie par un certain procédé de "coarse-graining". Dans ces conditions, le comportement macroscopique du système est décrit par un ensemble de variables "semi-macroscopiques" ou "coarse-grained", dont l'évolution est non-autonome puisqu'elle dépend en fait de toutes les variables dynamiques à travers un processus complexe de nature essentiellement non-markovienne. Pour rendre compte des lois macroscopiques, on cherche alors à représenter approximativement cette évolution compliquée par un processus plus simple, généralement markovien et irréversible, décrit par un système fermé d'équations ne portant que sur les seules variables "coarse-grained" (évolution autonome). Ceci implique naturellement la formulation d'hypothèses de nature statistique qui s'appuient sur le grand nombre de degrés de liberté du système, mais dont la validité est difficilement vérifiable. Pour les justifier de manière rigoureuse, on est donc conduit à étudier le comportement du système à la limite  $N \rightarrow \infty$ , et à définir des passages à la limite bien adaptés à chaque situation hors d'équilibre considérée. Dans la mesure où elles existent, de telles limites permettent alors d'interpréter les processus markoviens décrivant l'évolution irréversible des systèmes macroscopiques comme des processus limites qui peuvent être *déduits* de l'évolution dynamique exacte du système hors d'équilibre. Cette notion de processus limite joue ainsi en MSHE un rôle analogue à celui de la limite thermodynamique en théorie de l'équilibre ; elle permet d'établir sur une base rigoureuse, le passage d'une description réduite non-autonome et non-markovienne à une description réduite autonome et markovienne qui présente les propriétés requises d'irréversibilité et de dissipativité.

Les méthodes les plus couramment utilisées pour décrire l'évolution d'un système hors d'équilibre sont celles

relevant de la description cinétique, qui rentrent bien dans le cadre du schéma général esquissé ci-dessus. On sait que l'on dispose dans ce cas d'un certain nombre d'équations cinétiques (comme les équations de Boltzmann ou de Fokker-Planck) qui ont été établies par des raisonnements heuristiques et dont les propriétés d'irréversibilité sont bien connues. Or, ces équations reposent sur des hypothèses de nature statistique, telle l'hypothèse du "chaos moléculaire", qui apparaissent incompatibles avec les lois réversibles de la dynamique sous-jacente ; leur justification rigoureuse ne peut donc être envisagée qu'en se référant au caractère macroscopique du système, c'est-à-dire en considérant des situations limites où  $N \rightarrow \infty$ . C'est dans ce domaine que d'importants résultats ont été obtenus durant les années 70 ; ils portent essentiellement sur la démonstration de plusieurs théorèmes limites concernant soit des systèmes dilués (limite de Boltzmann-Grad) ou faiblement couplés (limite du couplage faible), soit des systèmes dominés par des interactions collectives (limite du champ moyen). Ces théorèmes permettent notamment de montrer sous quelles conditions la propriété de chaos moléculaire se conserve au cours du temps ; il s'ensuit que l'on peut alors reporter sur l'état initial du système toutes les hypothèses de nature statistique, et éliminer de ce fait toute possibilité de conflit avec les lois dynamiques. On est ainsi en mesure de comprendre comment s'effectue le passage de la description dynamique déterministe du système à une description markovienne caractérisée par des équations cinétiques du type de Boltzmann, de Fokker-Planck ou de Vlasov.

Nous nous proposons donc d'exposer dans cet article l'essentiel de ces résultats, en les rattachant aux méthodes générales et aux postulats fondamentaux de la Mécanique statistique. Le plan adopté résulte des idées directrices développées dans cette introduction. Il apparaît tout d'abord utile, pour mesurer les difficultés propres à la MSHE, de se référer au cas de l'équilibre et au statut de la MSE. C'est l'objet du chapitre 2 où, après avoir rappelé les principes qui sont à la base de la Mécanique statistique, nous analysons successivement les résultats les plus significatifs de la théorie ergodique, le rôle du passage à la limite thermodynamique et ses liens avec la théorie du transport au voisinage de l'équilibre. Le chapitre 3 est consacré à un examen des pro-

blèmes fondamentaux posés par la description des systèmes macroscopiques hors d'équilibre et à l'exposé des méthodes de type cinétique. Nous commençons par analyser les difficultés propres à l'étude du non-équilibre et par esquisser les méthodes générales de la MSHE, en mettant en évidence l'importance des notions de coarse-graining, de "description réduite autonome" et de processus limite. Nous étudions ensuite les aspects essentiels de la description d'un système au niveau cinétique, en développant le formalisme de la hiérarchie BBGKY et les idées de Bogolioubov concernant la définition du régime cinétique, que nous comparons au point de vue de la théorie cinétique des gaz au sens de Boltzmann. Enfin, nous exposons dans le chapitre 4 les principaux théorèmes limites qui ont été obtenus pour trois situations limites particulières, à savoir : la limite de Boltzmann-Grad et le théorème de Lanford pour un système de sphères dures, la limite du couplage faible et son application au modèle de Lorentz, la limite du champ moyen et le théorème de Braun et Hepp concernant le régime de Vlasov.

Pour terminer, il convient de souligner que les sujets traités dans ce mémoire comportent une grande diversité d'aspects qu'il nous était impossible de considérer dans leur ensemble. Nous nous sommes donc limité à ceux qui sont plus directement liés au problème de l'irréversibilité en nous inspirant notamment des articles de revue de J.L. Lebowitz [1], de O.E. Lanford [2], de O. Penrose [3] et de H. Spohn [4] ; nous renvoyons à ces articles, ainsi qu'à leur bibliographie, pour les développements que nous avons laissés de côté, en particulier ceux relatifs au domaine quantique et aux systèmes infinis.

## 2. Retour sur les problèmes fondamentaux de la Mécanique statistique à l'équilibre

### 2.1. Remarques générales.

La Mécanique statistique a pour objet l'étude des systèmes physiques à un très grand nombre  $N$  de particules, en vue de relier leur comportement macroscopique aux lois mécaniques qui gouvernent l'évolution microscopique de ces systèmes. Le but de cette discipline est donc d'établir un pont entre deux niveaux de description d'un même système :

- d'une part, le niveau microscopique, où le sys-

tème observé est conçu comme un système dynamique conservatif de  $N$  particules, obéissant aux lois de la mécanique classique (ou quantique), avec approximativement  $N \approx 10^{23}$  (pour un gaz dans des conditions normales). En théorie classique, on a ainsi un modèle déterministe et réversible, dans lequel l'état mécanique exact du système est déterminé par les  $6N$  paramètres  $(r_i, p_i)$  ( $i=1, 2, \dots, N$ ) représentant la position et l'impulsion de toutes les particules (supposées ponctuelles).

- d'autre part, le niveau macroscopique où l'état du système est au contraire décrit par un très petit nombre de grandeurs macroscopiques (par exemple, la température, la densité et la vitesse locale d'un fluide) ; celles-ci vérifient à notre échelle des lois généralement irréversibles et dissipatives, telles que les lois de la diffusion de Fick, de la conduction thermique de Fourier, etc. Du point de vue microscopique, la description macroscopique est donc une description hautement incomplète de l'état du système, en ce sens qu'à un même état macroscopique correspond toujours un très grand nombre d'états microscopiques possibles, tous également compatibles avec les données de l'observation macroscopique.

Dans la réalité physique, l'état microscopique sous-jacent du système se manifeste à notre échelle par l'existence de fluctuations par rapport à un certain état moyen. Par exemple, pour un système à l'état d'équilibre, les grandeurs macroscopiques sont indépendantes du temps et gardent des valeurs constantes ; mais, si l'on observe une grandeur  $A$  de manière suffisamment fine, on enregistre en fait au cours du temps de petites fluctuations irrégulières de  $A$  autour de la valeur constante  $\bar{A}$ . De même, au lieu d'observer le comportement de  $A$  au cours du temps, on peut aussi mesurer cette grandeur sur un grand nombre d'échantillons ( $E$ ) identiques au système considéré ; on trouve ainsi pour chaque échantillon une valeur différente de  $A$ , ces valeurs se regroupant toutes autour de la valeur macroscopique  $\bar{A}$ . Ces fluctuations étant totalement irrégulières et imprévisibles, on voit donc que la mesure d'une grandeur macroscopique est un événement *non reproductible* et que les lois macroscopiques évoquées ci-dessus n'ont de ce fait qu'un caractère approché.

Ces remarques conduisent naturellement à recourir à une description statistique de l'état macroscopique du système, fondée sur la considération de l'ensemble d'échantillons ( $E$ ) muni d'une certaine loi de probabilité. De ce point de vue, une grandeur macroscopique  $A$  devient une fonction aléatoire  $A(t; E)$  dont la valeur moyenne  $\overline{A(t; E)^E} \equiv \bar{A}^E(t)$ , prise sur l'ensemble des échantillons ( $E$ ) du système, est supposée égale à la grandeur mesurée à l'échelle macroscopique ; l'état macroscopique du système se trouve ainsi décrit par un processus stochastique. Pour être physiquement admissible, ce modèle général doit en outre satisfaire à deux propriétés importantes :

- D'abord, pour un système à l'équilibre, la valeur moyenne  $\bar{A}^E$  est indépendante du temps, ce qui conduit dans ce cas à considérer un processus stochastique stationnaire. Si l'on observe alors les fluctuations au cours du temps de  $A(t; E)$  pour un même échantillon, on peut également définir la valeur macroscopique de  $A$  par la moyenne temporelle  $\overline{A(t; E)^T}$  prise sur une durée  $T$  suffisamment longue ; dans cette autre perspective, on s'attend intuitivement à ce que la limite de la moyenne temporelle,  $\lim_{T \rightarrow \infty} \overline{A(t; E)^T}$ , soit égale à  $\bar{A}^E$  et ne dépende donc pas de l'échantillon considéré : c'est la *propriété d'ergodicité* qui joue un rôle important en MSE ; cette propriété est effectivement vérifiée par des variables aléatoires indépendantes (et s'identifie alors à la loi des grands nombres), mais demande à être démontrée dans le cas général d'un processus stationnaire quelconque.

- De plus, pour que  $A$  soit une grandeur "significative" à l'échelle macroscopique, il faut non seulement que la moyenne  $\bar{A}^E(t)$  soit égale à la grandeur effectivement observée, mais aussi que les valeurs de  $A(t; E)$  relatives à chaque échantillon individuel soient presque toutes voisines de  $\bar{A}^E(t)$ . On exprime cette condition en imposant au carré moyen des fluctuations  $(A(t; E) - \bar{A}^E(t))^2$ , de demeurer très petit comparé à  $(\bar{A}^E(t))^2$  (pour une grandeur extensive) ; ceci n'est

possible que pour des systèmes macroscopiques à un très grand nombre de particules, d'où l'importance de l'étude des propriétés du modèle pour  $N \rightarrow \infty$ . Remarquons encore que la condition précédente, essentielle pour avoir une "bonne description" macroscopique, concerne à la fois les lois de probabilité du processus et la définition même des grandeurs macroscopiques ; nous retrouverons ces deux aspects dans la formulation des problèmes propres à la MSHE.

Il reste maintenant à compléter ce schéma général en utilisant notre connaissance des lois dynamiques élémentaires qui gouvernent l'évolution du système à l'échelle microscopique ; c'est précisément l'objet de la Mécanique statistique dont nous allons maintenant développer les principes fondamentaux pour des systèmes classiques. Cette section est essentiellement consacrée à l'étude des problèmes propres aux systèmes en équilibre ; au cours de l'exposé, nous nous attacherons surtout à analyser les étapes du raisonnement qui conduisent à une justification *rigoureuse* des méthodes de la Mécanique statistique classique à l'équilibre, en nous efforçant de dégager clairement le rôle respectif des lois dynamiques et des propriétés statistiques résultant de la nature macroscopique du système.

## 2.2 Ensembles de Gibbs et postulat fondamental de la Mécanique statistique

Commençons par rappeler brièvement et sans démonstration les éléments essentiels du formalisme de la Mécanique statistique, en nous bornant pour simplifier à ses aspects classiques. Du point de vue microscopique, un système physique considéré comme isolé, est représenté en Mécanique classique par un système hamiltonien conservatif dont l'état dynamique est décrit par les  $N$  vecteurs  $\vec{x}_i = (\vec{r}_i, \vec{p}_i)$ ,  $i=1,2,\dots,N\dots$ , fixant la position et l'impulsion de chaque particule  $i$ . Du fait de l'évolution dynamique du système, les variables  $\vec{x}_i$  sont des fonctions du temps,  $\vec{x}_i \rightarrow \vec{x}_i(t)$ , et sont déterminées par les équations de Hamilton qui s'écrivent, sous forme condensée,

$$(2.1) \quad \frac{d\vec{x}_i(t)}{dt} = [\vec{x}_i(t), H] \equiv -L \vec{x}_i(t) ;$$

$H(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)$  est l'hamiltonien du système (indépendant du temps pour un système conservatif) auquel on associe l'opérateur de *Louville*  $L$  défini par  $L \equiv [H, \ ]$ , le symbole  $[ \ ]$  désignant naturellement le crochet de Poisson. D'une manière générale, l'équation du mouvement relative à une grandeur dynamique quelconque  $A(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)$ , ne dépendant pas explicitement du temps, s'écrit avec ces notations :

$$(2.2) \quad \frac{dA_t}{dt} = -L A_t, \quad \text{où} \quad A_t \equiv A[\vec{x}_1(t), \vec{x}_2(t), \dots, \vec{x}_N(t)].$$

Il est commode de représenter l'état dynamique d'un tel système par un point  $P$  de l'espace des phases  $\Gamma$  à  $6N$  dimensions, où  $P$  est défini par l'ensemble des coordonnées  $\vec{x}_i$  ; on écrira donc  $P \equiv \{\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N\} \in \Gamma$ , avec  $\Gamma = (\Lambda \times \mathbb{R}^3)^N$  si l'on suppose que le système est contenu dans une certaine enceinte  $\Lambda$  de volume  $V(\Lambda)$ .

Au cours du mouvement, le point représentatif  $P$  se transporte en  $P_t \equiv \{\vec{x}_1(t), \vec{x}_2(t), \dots, \vec{x}_N(t)\}$  et décrit une trajectoire dans  $\Gamma$  déterminée par les équations du mouvement (2.1). Comme à chaque point  $P$  correspond une et une seule trajectoire (unicité des solutions pour un hamiltonien suffisamment régulier), l'évolution dynamique du système engendre une transformation de l'espace des phases  $\Gamma$  en lui-même ; les équations (2.1) peuvent ainsi s'interpréter comme les transformations infinitésimales d'un groupe continu  $T_t$  d'automorphismes de  $\Gamma$ , à un paramètre  $t$ , tel que :

$$(2.3) \quad P \rightarrow P_t = T_t P, \quad \text{avec} \quad T_{s+t} = T_s T_t, \quad T_0 = 1,$$

où le point  $P$  représente l'état initial du système à l'instant  $t = 0$ .

Notons qu'un tel groupe est appelé un *flot hamiltonien* dans  $\Gamma$  et que les invariants de ce flot sont les constantes du mouvement du système (2.1). Ceci étant, toute grandeur dynamique est une fonction de phase  $A(P)$  définie sur  $\Gamma$  et appartenant à un certain espace fonctionnel ; son évolution au cours du temps est déterminée par l'équation du mouvement (2.2), dont la solution formelle peut s'écrire :

$$(2.4) \quad A_t(P) \equiv A(P_t) = A(T_t P) = e^{-Lt} A(P) \equiv U_t A(P),$$

$$\text{avec } U_{t+s} = U_t U_s, \quad U_0 = 1,$$

où  $U_t \equiv \exp[-Lt]$  représente le groupe des transformations induites dans l'espace fonctionnel de  $A$  par le groupe  $T_t$ .

Dans le cas où  $A(P)$  appartient à un espace de Hilbert, il résulte des propriétés de  $T_t$  (conservation de la mesure, cf. infra) que  $U_t$  est alors un opérateur unitaire de l'espace de Hilbert (Koopman [5]).

Ensembles de Gibbs. En se référant à la notion d'ensembles d'échantillons ( $\bar{E}$ ) introduite dans le paragraphe 2.1, on est conduit en Mécanique statistique à représenter l'état d'un système macroscopique par un ensemble de copies identiques au système observé, avec des états dynamiques différents mais tous compatibles avec les données de l'observation macroscopique : ce sont les *ensembles de Gibbs* qui sont représentés par des ensembles de points de l'espace  $\Gamma$ . Pour définir de tels ensembles, on se donne une mesure (ou distribution de probabilité)  $d\mu(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$  dans  $\Gamma$ , qui détermine le nombre de points représentatifs contenus dans l'élément de volume  $d\Gamma = d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_N$ ; si l'on suppose cette mesure absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue  $d\Gamma$ , un ensemble de Gibbs est alors défini par une densité en phase  $\rho(P) \equiv \rho(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) \geq 0$ , symétrique en  $(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)$ , telle que :

$$(2.5) \quad d\mu(P) = \rho(P) d\Gamma, \quad \int_{\Gamma} \rho(P) d\Gamma = 1,$$

la condition de normalisation résultant de l'interprétation de  $\rho(P)$  comme densité de probabilité.

#### Equation et théorème de Liouville

Au cours du mouvement, les points d'un ensemble de Gibbs décrivent une famille de trajectoires dans  $\Gamma$  et la densité en phase  $\rho(P)$  devient une fonction du temps

$\rho_t(P) = \rho(P, t)$ . Ce mouvement, engendré par le flot  $T_t$ , peut s'interpréter comme celui d'un fluide de probabilité dans  $\Gamma$ , de densité  $\rho(P, t)$  et de vitesse  $\vec{W} = \{\dot{x}_1, \dot{x}_2, \dots, \dot{x}_N\}$ . Or, d'après (2.1), ce fluide est incompressible ( $\text{div } \vec{W} = 0$ ); de l'équation de continuité du fluide, on déduit alors que  $\rho(P, t)$  obéit à l'équation de Liouville :

$$(2.6) \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{W} \cdot \vec{\nabla} \rho = [H, \rho] = L\rho.$$

En mettant (2.6) sous la forme  $\frac{d\rho}{dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + [\rho, H] = 0$ , on voit qu'elle exprime la conservation de la densité en phase le long d'une trajectoire; on a donc  $\rho_t(P_t) = \rho(P)$ , soit encore  $\rho_t(P) = \rho(T_{-t} P)$ . La solution formelle de (2.6) peut donc s'écrire :

$$(2.7) \quad \rho_t(P) \equiv \rho(P, t) = \rho(T_{-t} P) = e^{Lt} \rho(P) = U_{-t} \rho(P);$$

Elle permet en principe de calculer, à partir de la donnée initiale de  $\rho(P)$ , la densité en phase à l'instant  $t$ ,  $\rho_t(P)$ , qui reste positive et satisfait à la condition de normalisation (2.5) en vertu même de l'équation de Liouville.

Une autre conséquence importante de l'équation (2.6) est le célèbre *théorème de Liouville*, d'après lequel le volume d'un domaine quelconque de l'espace des phases reste invariant au cours du mouvement; ceci résulte immédiatement du fait que  $\rho_t(P)$  est un invariant intégral du mouvement du fluide de probabilité incompressible, et que  $\rho = \text{cte}$  est une solution évidente de l'équation de Liouville. Il s'ensuit que la mesure de Lebesgue  $d\mu_t = d\Gamma$  est une *mesure invariante* par rapport au groupe  $T_t$ ; cette mesure est un cas particulier des mesures indépendantes du temps que nous définirons ci-dessous. Si  $X \subset \Gamma$  est un ensemble mesurable quelconque de  $\Gamma$ , on a  $\mu_t(X) = \mu_0(T_t X)$ , ou en termes de densité de probabilité,  $\rho_t(P) = \rho_0(T_t P)$ .

La représentation d'un système physique macros-

copique par un ensemble de Gibbs revient à décrire ce système par le processus stochastique associé au mouvement dans  $\Gamma$  du point représentatif  $P_t = \phi(t; P)$ ; en effet, comme la "position" initiale  $P$  est maintenant une variable aléatoire de loi de probabilité  $\rho(P)d\Gamma$ ,  $P_t$  est une fonction aléatoire bien déterminée, ainsi d'ailleurs que toute grandeur dynamique  $A_t(P) = A(t, P)$ . Mais il est essentiel de remarquer que la loi temporelle de ce processus est rigoureusement déterministe, puisque les équations du mouvement (2.1) permettent de déterminer  $P_t$  dès que l'on a fixé le point initial  $P$ ; de même, l'équation de Liouville (du premier ordre en  $t$ ) permet de calculer  $\rho_t(P)$  à tout instant, une fois connue la densité initiale  $\rho(P)$ . On a donc affaire à un processus stochastique où la probabilité intervient seulement par les conditions initiales.

#### Postulat fondamental de la Mécanique statistique

Ces remarques étant faites, il reste à définir les grandeurs effectivement observées à l'échelle macroscopique; conformément à la méthode suivie, il est naturel de les supposer égales aux valeurs moyennes  $\bar{A}^\mu(t)$  des grandeurs dynamiques correspondantes  $A_t(P)$ , calculées sur l'ensemble de Gibbs associé à l'état du système. Par définition, on pose donc que les grandeurs macroscopiques sont données par

$$(2.8) \quad \bar{A}^\mu(t) = \int_{\Gamma} A_t(P) d\mu = \int_{\Gamma} A(T_t P) \rho(P) d\Gamma.$$

Comme le groupe  $T_t$  laisse invariant le volume  $d\Gamma$ , on montre aisément\* que (2.8) peut aussi s'écrire  $\bar{A}^\mu(t) = \int_{\Gamma} A(P) \rho_t(P) d\Gamma$ , de sorte que l'on a finalement :

\* On utilise à cet effet l'égalité  $\int_{\Gamma} A(T_t P) \rho(T_t P) d\Gamma = \int_{\Gamma} A(P) \rho(P) d\Gamma$ , qui résulte de l'invariance de  $d\Gamma$  par rapport à  $T_t$ .

$$(2.9) \quad \bar{A}^\mu(t) = \int_{\Gamma} A(T_t P) \rho(P) d\Gamma = \int_{\Gamma} A(P) \rho(T_{-t} P) d\Gamma,$$

c'est le *postulat fondamental* de la Mécanique statistique qui permet le calcul des grandeurs accessibles à l'observation macroscopique, une fois connue la densité en phase initiale  $\rho(P)$ . D'après (2.9), on voit que l'évolution temporelle des valeurs moyennes  $\bar{A}^\mu(t)$  peut se représenter de deux manières équivalentes : soit en considérant que les grandeurs dynamiques évoluent au cours du temps suivant (2.4) alors que l'état statistique du système  $\rho(P)$  demeure constant, soit au contraire en suivant l'évolution temporelle de  $\rho_t(P)$  déterminée par l'équation de Liouville (2.6), tandis que les grandeurs dynamiques  $A(P)$  restent constantes; on notera que ces deux représentations possibles de l'état d'un système en Mécanique statistique sont analogues respectivement aux représentations de Heisenberg et de Schrödinger pour l'état d'un système en Mécanique quantique.

#### 2.3 Ensembles stationnaires et Mécanique statistique à l'équilibre

Le formalisme de la Mécanique statistique étant ainsi précisé, il est clair que le problème fondamental de la théorie est de déterminer quel ensemble de Gibbs doit être associé à une situation macroscopique donnée. Or, on sait seulement que la densité en phase doit satisfaire à l'équation de Liouville qui permet de calculer  $\rho_t(P)$  à partir d'une distribution initiale  $\rho(P)$ ; comme la seule contrainte imposée à  $\rho(P)$  est d'être compatible avec les données de l'observation macroscopique, le choix de la densité en phase comporte donc une large part d'arbitraire, d'où le recours à des hypothèses de nature statistique mettant en jeu la "préparation" du système à l'instant initial. A cet effet, on adopte généralement l'une des deux démarches suivantes\* : (i) l'une consiste à admettre l'hypothèse d'égalité a priori des volumes égaux de l'espace des phases (Tolman [6]);

\* Pour une analyse plus détaillée de ces questions, voir par exemple O. Penrose [3].

(ii) l'autre repose sur un principe d'entropie maximum inspiré de la théorie de l'information (Jaynes [7]). Mis à part leurs implications épistémologiques, ces deux hypothèses ne sont justifiées en dernière analyse que par leurs conséquences, c'est-à-dire par le bon accord des prévisions ainsi obtenues avec les résultats de l'expérience.

Dans le cas d'un système à l'équilibre, ces deux hypothèses conduisent respectivement à la définition des ensembles *microcanonique* et *canonique* de Gibbs. En effet, un système à l'équilibre statistique est représenté par un ensemble indépendant du temps (ou une mesure invariante), tel que  $\rho_t(P) = \rho(P)$ , soit encore  $\partial\rho/\partial t = 0$ . D'après l'équation de Liouville (2.6), on a alors  $[H, \rho] = 0$ , de sorte que  $\rho$  peut être une fonction quelconque de l'hamiltonien  $H(P)$ ,  $\rho(P) = \rho[H(P)]$ , et éventuellement des autres intégrales globales\* du mouvement s'il en existe.

Ensemble microcanonique. Considérons alors le cas d'un système isolé à l'équilibre, dont l'énergie est fixée ; si l'on suppose qu'elle est comprise entre  $E$  et  $E + \delta E$ , où  $\delta E$  représente l'imprécision de la mesure macroscopique, l'ensemble des trajectoires possibles se trouve situé dans la "couche" de  $\Gamma$  comprise entre les deux hypersurfaces voisines  $H(P) = E$  et  $H(P) = E + \delta E$ . L'hypothèse d'égale probabilité a priori appliquée à cette situation, nous conduit à représenter l'état statistique du système par l'ensemble microcanonique défini par :

$$(2.10) \quad \rho(P) = \begin{cases} \text{cte,} & \text{si } E \leq H(P) < E + \delta E, \\ 0, & \text{ailleurs.} \end{cases}$$

\* On appelle intégrale (ou constante du mouvement) globale, une intégrale première conservative, indépendante du temps, qui garde la même valeur sur toutes les trajectoires possibles du système, contrairement aux intégrales "locales" qui sont attachées à une trajectoire particulière. Une intégrale globale telle que l'énergie définit dans  $\Gamma$  une famille d'hypersurfaces correspondant à toutes les valeurs possibles de la constante du mouvement considérée ; pour une valeur donnée de cette constante, toutes les trajectoires sont situées sur l'hypersurface correspondante ("isolating integral").

Si  $\delta E \rightarrow 0$ , les trajectoires du système sont confinées sur l'hypersurface d'énergie constante  $\Sigma_E$  définie par  $H(P) = E$  ; la mesure invariante de Lebesgue induit alors sur l'hypersurface  $\Sigma_E$ , la mesure invariante  $d\mu_0 = d\mu_\Sigma$  (notons que nous utiliserons  $d\mu_0$  pour désigner indifféremment les mesures microcanoniques (2.10) ou (2.11)) donnée par :

$$(2.11) \quad d\mu_0 \equiv d\mu_\Sigma = \frac{\delta(H-E)}{\int_\Gamma \delta(H(P)-E)d\Gamma} = \frac{1}{\Omega(E)} \frac{d\sigma}{|\text{grad}H(P)|},$$

$$(\mu_0(\Sigma_E) = 1, \Omega(E) = \int_\Gamma \delta[H(P)-E]d\Gamma),$$

où  $d\sigma$  est l'élément de surface sur  $\Sigma_E$  et où la mesure  $\Omega(E)$  de l'hypersurface  $\Sigma_E$  est appelée la *fonction de structure du système*. La mesure invariante (2.11) définit l'ensemble microcanonique sur l'hypersurface  $\Sigma_E$  ; elle engendre sur  $\Sigma_E$  un *processus stochastique stationnaire* qui décrit le comportement macroscopique d'un système isolé en équilibre, les grandeurs macroscopiques étant dans ce cas définies par les moyennes microcanoniques (ou moyennes en phase) :

$$(2.12) \quad \bar{A}^{\mu_0} = \int_\Gamma A(P)d\mu_0 = \frac{1}{\Omega(E)} \int_{\Sigma_E} A(P) \frac{d\sigma}{|\text{grad}H(P)|}.$$

Ensemble canonique. Considérons maintenant le cas où le système n'est pas isolé mais peut échanger de l'énergie avec son environnement (interaction avec un thermostat par exemple), de telle manière que seule son énergie moyenne soit fixée. L'application du principe de Jaynes conduit alors à décrire l'état statistique d'un tel système par l'ensemble canonique de Gibbs défini par :

$$(2.13) \quad \rho(P) = \frac{1}{Z} \exp[-\beta H(P)], \quad (Z = \int_\Gamma \exp[-\beta H(P)]d\Gamma = \int_0^\infty \exp(-\beta E)\Omega(E)dE),$$

qui représente la distribution de l'énergie d'un système en contact thermique avec un thermostat ; dans ce cas,  $\beta$  est inversement proportionnel à la température thermodynamique  $T$  ( $\beta = 1/kT$ ) et la constante  $Z$  est la "somme d'états" du système

qui permet le calcul des fonctions thermodynamiques usuelles\*.

Si l'on revient maintenant aux questions fondamentales évoquées dans l'Introduction, on voit qu'elles se ramènent, dans le cas de systèmes en équilibre, à justifier l'utilisation des ensembles microcanonique et canonique définis ci-dessus. Pour être en accord avec l'expérience usuelle, il faut en fait montrer que, pour un système isolé, les valeurs moyennes  $\bar{A}^\mu(t)$  définies par (2.9) tendent lorsque  $t \rightarrow \infty$  vers une limite précisément égale à la moyenne microcanonique (2.12) ; dans cette perspective, on doit donc établir sous quelles conditions un tel résultat peut être déduit rigoureusement des lois de la dynamique appliquées à des durées infiniment longues. On est ainsi conduit à étudier les propriétés statistiques des ensembles de trajectoires d'un flot hamiltonien, ce qui constitue l'un des aspects de la théorie ergodique.

2.4. Propriétés ergodiques des systèmes dynamiques. Le problème ergodique a trouvé son origine dans les tentatives faites pour établir un pont entre la description statistique d'un système macroscopique et le comportement dynamique de ce système sur de très longues durées. Bien que posé dès les débuts de la théorie cinétique des gaz par ses fondateurs (Maxwell, Boltzmann), ce problème n'a reçu une formulation mathématique rigoureuse qu'à partir des années 1930. Un exposé, même succinct, de la théorie ergodique sortant évidemment du cadre de cet article, nous nous bornerons à en rappeler les résultats les plus significatifs pour les besoins de la Mécanique statistique\*\*.

Si l'on considère un système conservatif et isolé, son évolution est représentée dans l'espace des phases par une *seule* trajectoire située sur une hypersurface d'éner-

\* Rappelons que l'on définit également, dans le même esprit, des ensembles grand-canoniques avec un nombre variable de particules.

\*\* Pour un exposé plus détaillé, on consultera par exemple les ouvrages de Halmos [8], Arnold et Avez [9], Sinai [10].

gie constante  $\mathcal{E}_E$  ; la connaissance de cette trajectoire, ainsi que celle de la valeur instantanée  $A(P_t)$  d'une grandeur dynamique quelconque, implique évidemment l'intégration de toutes les équations du mouvement. On remarque alors que l'observation macroscopique d'une grandeur  $A$  ne porte jamais sur sa valeur instantanée, mais qu'elle permet seulement d'atteindre sa valeur moyenne temporelle  $\overline{A(P_t)}^T$ , prise sur un certain intervalle de temps  $T$  (durée de l'observation) ; or  $T$  est généralement grand par rapport aux échelles de temps qui caractérisent l'évolution microscopique du système ; comme ces valeurs moyennes ne peuvent elles-mêmes être calculées que si l'on connaît effectivement la trajectoire de  $P_t$ , on est donc amené à considérer leur comportement pour  $T \rightarrow \infty$ , c'est-à-dire à étudier les limites des moyennes temporelles :

$$(2.14) \quad \overline{A(P_t)}^\infty = \lim_{T \rightarrow \infty} \overline{A(P_t)}^T = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(P_t) dt,$$

l'objectif poursuivi étant de montrer que ces limites ne dépendent pas de l'état initial et peuvent s'identifier aux moyennes microcanoniques (2.12). C'est l'objet de la théorie ergodique qui se décompose essentiellement en deux parties : (a) prouver l'existence des moyennes temporelles  $\overline{A(P_t)}^\infty$  ; (b) établir dans quelles conditions ces limites sont les mêmes pour toutes les trajectoires, ce qui constitue l'ergodicité proprement dite et entraîne l'égalité  $\overline{A(P_t)}^\infty = \bar{A}^\mu$ .

a. Théorèmes ergodiques. Ils permettent de prouver l'existence des limites  $\overline{A(P_t)}^\infty$  pour divers types d'espaces fonctionnels : si  $A(P)$  est une fonction sommable,  $A(P) \in L_1(\Gamma, \mu_0)$ , on a une convergence presque sûre (Birkhoff), si  $A(P)$  est de carré sommable,  $A(P) \in L_2(\Gamma, \mu_0)$ , on a une convergence en moyenne quadratique (Von Neumann, Hopf, ...), etc. Mentionnons, à titre d'exemple, le théorème de Birkhoff ; il s'énonce : si  $\Omega \subset \Gamma$  est un ensemble invariant de  $\Gamma$  (par exemple l'hypersurface  $\mathcal{E}_E$ ) et si  $A(P) \in L_1(\Gamma, \mu_0)$  est bien définie sur  $\Omega$ , on a

$$(2.15) \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T A(P_t) dt = A^*(P), \text{ p.p. (presque partout),}$$

c'est-à-dire sauf, peut-être, sur un ensemble de mesure nulle (par rapport à  $\mu_0$ ), de plus, la limite  $A^*(P) \in L_1(\Gamma, \mu_0)$  possède deux propriétés importantes : (i) elle est invariante par rapport au flot  $T_t$ , soit  $A^*(T_t P) = A^*(P)$ , p.p., de sorte que  $A^*(P)$  est constante sur chaque trajectoire ; (ii) si, de plus,  $\mu_0(\Sigma_E)$  (ou  $\mu_0(\Omega)$ )  $< \infty$ , on a aussi :

$$(2.16) \int_{\Sigma_E} A^*(P) d\mu_0 = \int_{\Sigma_E} A(P) d\mu_0 = \bar{A}^{\mu_0}.$$

b. Ergodicité et transitivité métrique. D'après ce qui précède, on voit que le résultat recherché sera atteint si  $A^*(P)$  est indépendante de  $P$ . La condition nécessaire et suffisante pour qu'il en soit ainsi est que le flot  $T_t$  possède la propriété de *transitivité métrique*, c'est-à-dire que l'hypersurface  $\Sigma_E$  (ou plus généralement l'ensemble invariant  $\Omega$ ) ne puisse être décomposée en deux sous-ensembles *invariants* et de *mesure strictement positive\**. Si cette condition est satisfaite, on déduit immédiatement de l'invariance de  $A^*(P)$  que cette limite est constante presque partout sur  $\Sigma_E$  (ou  $\Omega$ ) et que l'on a d'après (2.16) :

$$(2.17) \overline{A(P_t)}^\infty = \bar{A}^{\mu_0};$$

c'est la propriété d'*ergodicité*, qui est donc équivalente à la transitivité métrique et qui exprime l'égalité des moyennes temporelles et des moyennes en phase (ou moyennes microcanoniques) ; on a ainsi ramené le calcul des limites  $\overline{A(P_t)}^\infty$  à celui des moyennes en phase, c'est-à-dire à un problème géométrique ne demandant pas l'intégration des équations du mouvement. Remarquons que la propriété de transitivité métrique pour l'hypersurface  $\Sigma_E$  revient à admettre que l'éner-

\*Notons que cette propriété exprime dans un langage mathématiquement correct l'idée intuitive de Boltzmann selon laquelle la trajectoire d'un système ergodique "remplit" toute l'hypersurface  $\Sigma_E$ .

gie  $H(P) = E$  est la seule intégrale première globale ("isolating integral") du système ; c'est donc une hypothèse très forte sur la structure dynamique du système et, bien que l'on connaisse maintenant de nombreux exemples de systèmes ergodiques, on ne dispose pas de critère général permettant de reconnaître si un système dynamique quelconque est ergodique.

Pour la Mécanique statistique, le point important est le suivant : *pour un système ergodique, la seule mesure invariante, absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue  $d\Gamma$ , est la mesure de Lebesgue elle-même* ; ainsi, se trouve justifiée, à partir d'arguments tirés de la dynamique, l'utilisation de l'ensemble microcanonique pour décrire l'état d'un système isolé. On remarquera toutefois qu'il faut admettre que les grandeurs macroscopiques sont bien représentées par les limites  $\overline{A(P_t)}^\infty$  ; or ceci n'est physiquement acceptable que pour des systèmes à l'équilibre, pour lesquels la durée d'observation doit être suffisamment longue pour que l'état d'équilibre soit effectivement atteint. Par contre, l'ergodicité ne permet de tirer aucune conclusion concernant les processus de relaxation vers l'équilibre, puisqu'elle détermine seulement l'état moyen du système sur de très longues durées.

c. Mixing. La propriété d'ergodicité ne suffit donc pas pour servir de fondement à la Mécanique statistique, pour laquelle il faut prouver la convergence de la valeur moyenne instantanée  $\overline{A}^\mu(t)$  vers la moyenne microcanonique  $\bar{A}^{\mu_0}$ . Ce résultat peut être établi si le système dynamique possède la propriété de *mixing* qui constitue une exigence sur la nature du système plus forte que l'ergodicité. Par définition, un flot hamiltonien sur  $\Sigma_E$  (ou sur un ensemble invariant  $\Omega$ ) est *mixing* si, étant donnés deux sous-ensembles mesurables quelconques  $X$  et  $Y \subseteq \Sigma_E$ , on a :

$$(2.18) \lim_{t \rightarrow \infty} \mu_0(T_t X \cap Y) = \mu_0(X)\mu_0(Y), \quad \mu_0(\Sigma_E) = 1;$$

comme l'ensemble  $Y$  est quelconque, cette condition exprime le fait que l'ensemble  $T_t X$  s'étale uniformément sur  $\Sigma_E$  lorsque

$t \rightarrow \infty$ . Du point de vue de la Mécanique statistique, cette définition n'est en fait significative que pour des ensembles de mesure positive; on rejoint ainsi, énoncées sous une forme rigoureuse, les idées de Gibbs (développées systématiquement par P. et T. Ehrenfest ([11]) d'après lesquelles l'irréversibilité macroscopique est une conséquence de la structure granulaire ("coarse-graining") de l'espace des phases imposée par les conditions mêmes de l'observation macroscopique; nous verrons, dans la section 3, l'application de ces idées à la MSHE.

Pour les besoins de la Mécanique statistique, il est utile de donner une définition équivalente de la propriété (2.18) dans le langage fonctionnel: on peut montrer [9] que le flot  $T_t$  est mixing si, et seulement si,

$$(2.19) \quad \lim_{t \rightarrow \infty} (A_t(P), B(P))_0 = (A(P), 1)_0 (1, B(P))_0 = \bar{A}^{\mu_0} \cdot \bar{B}^{\mu_0},$$

où  $A(P)$  et  $B(P)$  sont deux fonctions quelconques de carré sommable, soit  $A(P), B(P) \in L_2(\Gamma, \mu_0)$ , et où  $(A(P), B(P))_0$  est le produit scalaire défini sur  $L_2(\Gamma, \mu_0)$  avec la mesure  $\mu_0$

(soit  $(A, B)_0 = \int_{\Sigma_E} AB \, d\mu_0$ ). De la propriété (2.19), résultent immédiatement deux conséquences importantes:

(i) En remarquant que  $(A_t, B)_0 \equiv \langle A_t B \rangle$  est la fonction de corrélation temporelle des deux fonctions  $A(P)$  et  $B(P)$  pour un système en équilibre, on voit que cette fonction de corrélation satisfait à la relation (2.19) si le système est mixing. Pour la fonction d'autocorrélation temporelle  $\langle A_t A \rangle$ , on a de même:

$$(2.20) \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \langle A_t A \rangle = (\bar{A}^{\mu_0})^2 = \langle A \rangle^2, \quad (\bar{A}^{\mu_0} \equiv \langle A \rangle);$$

enfin, si la fonction  $A(P)$  est telle que  $\langle A \rangle = 0$  (par exemple si  $\bar{A} = \vec{v}_i$ , vitesse de la particule  $i$ ), (2.20) devient:

$$(2.21) \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \langle A_t A \rangle = 0, \quad (\langle A \rangle = 0),$$

qui montre que, pour un système mixing, la fonction d'autocorrélation relative à une telle fonction  $A(P)$  tend vers zéro lorsque  $t \rightarrow \infty$ .

(ii) Si  $B(P)$  représente une densité en phase initiale hors d'équilibre  $\rho(P)$ , satisfaisant seulement à la condition de normalisation  $\bar{\rho}^{\mu_0} = 1$ , on voit d'après (2.8) que la propriété de mixing (2.19) entraîne la relation:

$$(2.22) \quad \lim_{t \rightarrow \infty} (A_t(P), \rho(P))_0 = \lim_{t \rightarrow \infty} \bar{A}^{\mu}(t) = \bar{A}^{\mu_0}$$

qui exprime bien la relaxation des valeurs moyennes instantanées  $\bar{A}^{\mu}(t)$  vers les moyennes microcanoniques  $\bar{A}^{\mu_0}$ . Comme

$$(2.22) \text{ s'écrit encore : } \lim_{t \rightarrow \infty} (A(P), \rho_t(P))_0 = (A(P), 1)_0 (1, \rho(P))_0 = \bar{A}^{\mu_0} \cdot \bar{\rho}^{\mu_0} = \bar{A}^{\mu_0},$$

d'où l'on peut conclure que: pour un système mixing, toute distribution (ou mesure) absolument continue par rapport à la mesure de Lebesgue  $d\mu_0$ , tend vers la mesure de Lebesgue lorsque  $t \rightarrow \infty$  (au sens de la convergence définie ci-dessus). C'est la propriété désirée pour que la Mécanique statistique puisse rendre compte des processus de retour à l'équilibre.

Mais ce résultat n'est obtenu qu'au prix d'une hypothèse sur la nature du système, hypothèse qui est encore plus forte que celle de l'ergodicité. Il est aisé, en effet, de voir que le mixing implique la transitivité métrique: prenons  $Y = X$  dans (2.18) et supposons  $X$  invariant; on a alors  $T_t X \cap X = X$  et, à la limite,  $\mu_0(X) = [\mu_0(X)]^2$ , d'où  $\mu_0(X) = 0$ , ou 1, ce qui établit la transitivité métrique et donc l'ergodicité du flot  $T_t$ . Par contre, la réciproque n'est pas vraie car on sait construire des modèles simples de systèmes ergodiques qui ne sont pas mixing (cas des translations ergodiques du tore [9]).

#### d. Systèmes dynamiques à propriétés stochastiques. Théorème de Sinai.

Compte tenu des résultats précédents, l'étude des fondements de la Mécanique statistique se trouve ainsi orientée vers la recherche et la construction de modèles présentant les propriétés requises d'ergodicité et de mixing. Ces problèmes relèvent de la théorie générale des systèmes dynamiques abs-

traits qui a connu dernièrement d'importants développements dont nous ne pouvons rendre compte ici (à ce propos, voir notamment Arnold et Avez [9] et les références contenues dans cet ouvrage). Nous nous bornerons seulement à souligner les progrès significatifs réalisés dans deux domaines importants pour notre sujet : (i) les résultats relatifs à la stabilité des systèmes "intégrables" (théorème KAM) et la mise en évidence d'une zone de *transition stochastique* entre trajectoires régulières et trajectoires "chaotiques" ; (ii) les nombreux travaux qui ont permis de montrer l'existence et d'étudier les propriétés de classes de systèmes dynamiques à caractères "fortement stochastiques" (C-systèmes, K-systèmes), qui sont ergodiques et mixing et présentent une très grande instabilité par rapport aux conditions initiales.

Du point de vue de la Mécanique statistique, la question se pose alors de savoir si l'on peut construire de tels modèles qui soient en même temps suffisamment réalistes pour décrire des systèmes physiques. Le résultat le plus important obtenu jusqu'à maintenant dans ce sens est le *théorème de Sinai* relatif à un système constitué de  $N$  sphères dures élastiques ( $N$  fini)\*, contenues dans une boîte de dimensions finies aux parois parfaitement réfléchissantes (billards). Ce théorème nous apprend qu'un tel modèle est un K-système qui possède, entre autres, la propriété de mixing (et donc d'ergodicité) ; ce résultat a été effectivement démontré pour  $N = 2, 3$ , et bien que son extension à  $N$  quelconque, mais fini, soit considérée comme acquise, la démonstration complète ne semble pas avoir encore été explicitée [12]. Une conséquence importante de ce théorème peut alors être tirée de la relation (2.21) ; si l'on considère, par exemple, l'autocorrélation de la vitesse  $\vec{v}_i$  d'une particule  $i$  quelconque, on a pour tout système fini de  $N$  sphères,

$$(2.23) \quad \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \vec{v}_i(t) \vec{v}_i(0) \rangle = 0,$$

puisque  $\vec{v}_i$  est une fonction de carré sommable, telle que  $\langle \vec{v}_i^2 \rangle = 0$ . Il faut souligner qu'il s'agit là d'un résultat de

\* Ce modèle est appelé parfois gaz de Boltzmann-Gibbs.

dynamique générale, valable quel que soit  $N$ , grand ou petit, contrairement à l'intuition physique selon laquelle la décroissance des fonctions de corrélation ne pourrait être obtenue que si  $N \rightarrow \infty$  ; nous verrons plus loin une autre conséquence importante de (2.21), à propos du calcul des coefficients de transport.

## 2.5 Limite thermodynamique et Thermodynamique statistique

Etant donnés ces résultats remarquables, on est conduit à se demander si la propriété de mixing est suffisante pour servir à elle seule de fondement à la Mécanique statistique. Il est clair tout d'abord qu'elle est certainement mieux adaptée que l'ergodicité aux besoins de cette discipline, puisqu'elle permet de prouver qu'un système, initialement hors d'équilibre, tend à évoluer vers un état d'équilibre. Toutefois, la théorie générale vaut pour des systèmes dynamiques quelconques, qu'ils soient microscopiques ou macroscopiques, et elle ne donne pas d'indication sur la rapidité du processus d'uniformisation (temps de relaxation), dont la durée devrait être assez courte à l'échelle macroscopique pour que l'état d'équilibre soit effectivement atteint. De plus, les résultats obtenus concernent seulement les valeurs moyennes  $\bar{A}^\mu(t)$  des grandeurs dynamiques alors que, du point de vue de la Mécanique statistique, on doit encore justifier l'identification de ces valeurs moyennes aux grandeurs macroscopiques effectivement observées.

Si l'on se réfère alors à l'approche stochastique exposée dans le § 2.1, on voit qu'une telle justification suppose nécessairement que la valeur instantanée de la grandeur dynamique  $A(P_t)$ , relative à l'un quelconque des systèmes de l'ensemble, ne s'écarte pas sensiblement de sa valeur moyenne  $\bar{A}^\mu(t)$  ; autrement dit que le carré moyen des fluctuations  $(A(P_t) - \bar{A}^\mu(t))^2$  reste très petit comparé à  $(\bar{A}^\mu(t))^2$ , dans le cas d'une grandeur extensive (qui croît proportionnellement à  $N$ ). Or il est bien connu dans la théorie des fluctuations à l'équilibre, que la dispersion  $D(A)$  d'une grandeur

extensive est proportionnelle au nombre  $N$  de particules\*, soit avec nos notations :

$$(2.24) \quad D(A) \equiv \overline{(A(P) - \bar{A}^{\mu_0})^2}^{\mu_0} = O(N)$$

de sorte que les fluctuations, égales à  $[D(A)]^{\frac{1}{2}}$ , sont de l'ordre de  $N^{\frac{1}{2}}$  ; bien que grandes en valeur absolue, leur valeur relative, comparée à  $\bar{A}^{\mu_0} (= O(N))$ , décroît avec  $N^{-\frac{1}{2}}$  puis que l'on a :  $[D(A)]^{\frac{1}{2}}/\bar{A}^{\mu_0} = O(N^{-\frac{1}{2}})$ . On en conclut que la valeur relative de ces fluctuations est négligeable dès que  $N$  est très grand et qu'elle devient nulle lorsque  $N \rightarrow \infty$  ; ce n'est donc qu'à cette limite que la valeur moyenne  $\bar{A}^{\mu_0}$  si elle existe (!), peut être *rigoureusement* identifiée à la grandeur macroscopique observée. On constate ainsi que la propriété de mixing est insuffisante, à elle seule, pour justifier les méthodes de la Mécanique statistique ; nous verrons d'ailleurs un autre exemple de cette insuffisance au paragraphe suivant. Comme l'on pouvait s'y attendre intuitivement, il est donc nécessaire de tenir compte du caractère macroscopique du système en considérant le passage à la limite  $N \rightarrow \infty$ .

Pour donner une formulation plus précise à ces idées générales, on est conduit, dans le cas de l'équilibre, à effectuer le passage à la limite des "grands systèmes" ou *limite thermodynamique*, dans laquelle  $N, E, V \rightarrow \infty$  de telle manière que les rapports  $N/V \rightarrow n$ ,  $E/V \rightarrow e$ , où les constantes  $n$  et  $e$  sont respectivement la densité numérique et la densité d'énergie du système. On doit alors étudier les propriétés limites du système en vue de montrer que les valeurs moyennes de la MSE existent effectivement à cette limite et qu'elles s'identifient aux fonctions thermodynamiques usuelles. On peut ainsi obtenir une déduction *rigoureuse*\*\* des résultats de la Thermodynamique statistique, à partir des principes fondamentaux de la Mécanique

\* Ce résultat a été rigoureusement démontré par Khintchine

[13] pour des fonctions sommatoires du type  $A(P) = \sum_{i=1}^N A_i(\vec{x}_i)$  ; la démonstration est en fait une application du théorème limite fondamental du calcul des probabilités, en accord avec l'argumentation de ce paragraphe.

\*\* On voit ici avec plus de précision, ce qu'il faut entendre par "résultats rigoureux".

statistique\* ; naturellement, la possibilité d'une telle déduction dépend étroitement de la nature de l'hamiltonien, donc des propriétés du potentiel d'interaction entre les particules du système.

Du point de vue des fondements de la Mécanique statistique, on peut aborder ce programme de deux manières différentes. L'une d'elles consiste à considérer le système physique comme isolé, et à admettre qu'il est ergodique et que son énergie est connue avec une imprécision  $\delta E$  ; l'état statistique de ce système est dans ce cas décrit par l'ensemble microcanonique (2.10). Les théorèmes sur la limite thermodynamique permettent alors de prouver l'existence de la densité d'entropie  $s = s(n, e)$ , lorsque le potentiel d'interaction est "stable et fortement tempéré"\*\*, conditions qui sont satisfaites par la plupart des potentiels usuels. On obtient aussi des résultats analogues pour les autres fonctions thermodynamiques, en vertu de l'équivalence thermodynamique des ensembles microcanonique, canonique et grand-canonique, qui a pu être rigoureusement établie à la limite thermodynamique pour certains types de potentiel.

Dans une autre approche de ces problèmes, on s'efforce de tenir compte des situations habituellement envisagées par la Thermodynamique, en considérant le système physique, non plus comme isolé, mais comme étant en contact thermique avec un "grand système" (thermostat). On suppose que le système peut échanger de l'énergie avec ce thermostat, bien

\*Pour souligner encore l'importance de cette notion de limite thermodynamique, il convient d'en signaler deux autres conséquences : l'élimination des effets de parois (conditions aux limites), nécessaire à la définition de grandeurs "globales", et la possibilité d'interpréter les transitions de phase comme des discontinuités des grandeurs thermodynamiques.

\*\*Pour la définition de ces termes, voir les exposés d'ensemble de D. RUELLE [14] et R.B. GRIFFITHS [15] ; rappelons que les premiers résultats rigoureux dans ce domaine sont dus, pour l'essentiel, aux travaux de Ruelle et de Fisher, qui ont été suivis de nombreux autres.

que l'énergie d'interaction soit considérée comme négligeable au regard de l'énergie du système global ; l'hamiltonien  $H$  du système global peut s'écrire dans ce cas :  $H = H_1 + H_2$ , où  $H_1$  et  $H_2$  représentent respectivement les hamiltoniens du système (1) et du thermostat (2). Si l'on admet alors que le système global est ergodique et que son énergie est fixée et égale à  $E$ , son état statistique est décrit par l'ensemble microcanonique (2.11),  $d\mu_0 = [\Omega(E)]^{-1} \delta(H-E) = [\Omega(E)]^{-1} \delta(H-E_1-E_2)$ , où  $\Omega(E)$  est la fonction de structure du système global, et  $E_1$  et  $E_2$  les énergies respectives du système et du thermostat. En tenant compte de la loi de composition des fonctions de structure  $\Omega(E)$ , (cf. Khintchine [13]) on montre que la loi de distribution en phase du système considéré (1), en interaction avec le thermostat, est donnée par :

$$(2.25) \quad \rho_1(P_1) = \Omega_2[E - H_1(P_1)]/\Omega(E),$$

où  $P_1$  est un point de l'espace des phases relatif au système (1) et où  $\Omega_2$  est la fonction de structure du thermostat. Comme le thermostat est supposé "beaucoup plus grand" que le système (1), on recherche la valeur limite de  $\rho_1(P_1)$  qui est déterminée par le comportement des fonctions de structure à la limite thermodynamique. Si l'on considère, par exemple, le thermostat comme constitué d'un très grand nombre  $N_2$  de particules sans interaction (cas d'un gaz idéal), l'application du théorème limite fondamental du calcul des probabilités, montre que l'on a, lorsque  $N_2 \rightarrow \infty$ ,

$$(2.26) \quad \rho_1(P_1) = Z_1^{-1} \exp[-\beta H_1(P_1)]$$

où  $\beta = \Omega_2'(E)/\Omega_2(E)$  est l'inverse de la température absolue ; ce résultat a été étendu au cas où les particules du thermostat sont en interaction par Rechtman et Penrose [16]. Ainsi peut-on justifier l'utilisation de l'ensemble canonique pour représenter un système physique en interaction avec un thermostat à la température  $(k\beta)^{-1}$  ; on remarquera d'ailleurs que la différence entre cette description et celle fournie par l'ensemble microcanonique tend à disparaître pour un grand système, en raison de l'équivalence de ces ensembles à la limite thermodynamique.

Les raisonnements précédents permettent ainsi de donner une base mathématique rigoureuse aux concepts fondamentaux de la MSE, et mettent en évidence la nécessité du passage à la limite  $N \rightarrow \infty$ . Dans cette démarche, on distingue clairement quel est le rôle respectif qui est imparti d'une part à la dynamique du système et d'autre part à ses dimensions macroscopiques ( $N$  très grand) ; (1) en admettant les propriétés d'ergodicité et de mixing, on justifie d'abord l'utilisation des ensembles stationnaires de Gibbs pour décrire l'état d'équilibre du système ; (2) par le passage à la limite thermodynamique, on montre ensuite que les valeurs moyennes de la Mécanique statistique tendent effectivement vers les grandeurs thermodynamiques usuelles. Comme les systèmes physiques réels ont toujours, en théorie classique, un nombre  $N$  très grand mais *fini* de particules, on peut donc prévoir que les grandeurs macroscopiques observées effectueront de petites fluctuations (d'ordre de grandeur relatif  $N^{-1/2}$ ) autour des valeurs prévues par la Thermodynamique, l'existence de ces dernières étant *garantie* par les théorèmes sur la limite thermodynamique.

Il est important de remarquer que la démarche précédente met en jeu deux passages à la limite successifs, dont l'ordre n'est pas indifférent : on effectue d'abord la limite  $T \rightarrow \infty$  (ergodicité et mixing), puis la limite  $N \rightarrow \infty$  (limite thermodynamique), ce qui revient à donner une certaine prépondérance aux considérations dynamiques. Cependant, du point de vue de la Mécanique statistique, il peut apparaître utile de mettre l'accent, en premier lieu, sur la nature macroscopique du système, donc d'envisager la démarche inverse consistant à effectuer d'abord le passage à la limite  $N \rightarrow \infty$  ; nous verrons d'ailleurs, dans le paragraphe suivant, un exemple de problèmes relevant de la MSHE où cette autre démarche s'impose si l'on veut rendre compte des propriétés *dissipatives* d'un système hors d'équilibre. On est conduit dans ce cas à considérer d'emblée des systèmes *infinis*, au lieu d'une suite infinie de systèmes *finis*, et à étudier l'évolution temporelle de tels systèmes, notamment leurs propriétés d'ergodicité et de mixing. Cette approche a donné lieu à de nombreux et importants travaux (voir notamment Ruelle [14], Penrose [3] et Lanford [2]) dont l'analyse sortirait du cadre de cet article ; nous nous bornerons simplement à signaler que la des-

cription de l'évolution de systèmes infinis hors d'équilibre rencontre des difficultés mathématiques qui n'ont été que partiellement surmontées.

### 2.6 Limite thermodynamique et théorie du transport au voisinage de l'équilibre

Il nous faut maintenant examiner un autre exemple de l'insuffisance de la propriété de mixing qui concerne plus particulièrement les fondements de la MSHE : il est dû à un intéressant argument de Lebowitz [1a], portant sur la définition des coefficients de transport à partir de la théorie de Kubo [17]. On sait en effet que la connaissance de l'état d'équilibre d'un système permet également de décrire ses propriétés hors d'équilibre dans un état faiblement perturbé par rapport à l'équilibre ; ceci est une conséquence des relations de "fluctuation-dissipation" qui relient les effets dissipatifs (phénomènes de transport), se manifestant dans un état voisin de l'équilibre, à la régression des fluctuations du système à l'équilibre. Une formulation très générale de ces relations peut être déduite de la théorie de la réponse linéaire de Kubo, d'après laquelle la variation macroscopique d'une grandeur quelconque due à une petite perturbation du système est égale à l'intégrale sur le temps de la fonction de corrélation à l'équilibre des grandeurs microscopiques correspondantes. Comme ces fonctions de corrélation sont en relation avec les fluctuations du système à l'équilibre, on voit que le processus stochastique stationnaire associé à la mesure  $\mu_0$  permet aussi de décrire l'évolution hors d'équilibre de systèmes "peu éloignés" de l'état d'équilibre : ainsi se trouve mis en évidence un lien important entre Mécanique statistique à l'équilibre et hors d'équilibre.

De ce point de vue, l'étude des phénomènes de transport devient une application particulière de la théorie générale de la réponse linéaire ; on en déduit que les coefficients de transport s'expriment, à l'approximation linéaire, par des intégrales sur le temps des fonctions d'autocorrélation temporelles des "flux" correspondants. Comme ces flux peuvent s'écrire en termes de crochets de Poisson, les coefficients de transport sont donc définis par des intégrales temporelles de la forme  $\int_0^\infty \langle A_t A \rangle dt$ , où les fonctions de phase

$A(P)$  sont telles que  $A = [a, H] = \frac{da}{dt}$  ; ce sont les formules de Green-Kubo. Remarquons que l'on a alors  $\langle A \rangle = \langle \frac{da}{dt} \rangle = \frac{d}{dt} \langle a \rangle = 0$ , les valeurs moyennes à l'état d'équilibre étant indépendantes du temps. Par exemple, le coefficient de diffusion de la loi de Fick est donnée par :

$$(2.27) \quad D = \int_0^\infty \langle v_{1x}(t) v_{1x}(0) \rangle dt,$$

avec dans ce cas,  $A = v_{1x}$ ,  $a = q_{1x}$ .

Ceci étant, supposons que le système considéré est mixing et constitué d'un nombre fini de particules ; si  $A \in L_2(\Gamma, \mu_0)$ , les fonctions d'autocorrélation précédentes satisfont alors à la relation (2.21), de sorte que l'on a  $\langle A_t A \rangle \rightarrow 0$ , lorsque  $t \rightarrow \infty$ . Mais, d'après les formules de Green-Kubo, la valeur des coefficients de transport est donnée par l'intégrale temporelle de ces fonctions d'autocorrélation et dépend donc de la rapidité de leur décroissance lorsque  $t \rightarrow \infty$ .

On voit ainsi quel est l'intérêt des nombreux travaux qui ont été récemment consacrés à l'étude du comportement des fonctions d'autocorrélation temporelle pour  $t \rightarrow \infty$  (voir par exemple [18]) ; nous ne pouvons ici que mentionner ces problèmes, en rappelant toutefois qu'une décroissance asymptotique en  $(t_0/t)^{d/2}$  semble maintenant bien établie\*, contrairement à la relaxation exponentielle qui n'est vérifiée que pour de courtes durées de l'ordre de quelques  $t_0$  (problème des longues "queues temporelles" des fonctions de corrélation). Quoiqu'il en soit, il est facile de montrer que si le système est fini et mixing, l'intégrale temporelle des fonctions d'autocorrélation tend également vers zéro lorsque  $t \rightarrow \infty$  [1a, 19]. En effet, si  $A(P)$  et  $a(P) \in L_2(\Gamma, \mu_0)$ , on a d'abord (avec  $A(t) \equiv A_t(P)$ ) :

$$(2.28) \quad \int_0^T \langle A(t), A \rangle dt = \int_0^T \left\langle \frac{da}{dt}, A \right\rangle dt = \langle a(T), A \rangle - \langle a, A \rangle ;$$

\* où  $d$  est le nombre de dimensions de l'espace physique et  $t_0$  le temps de libre parcours moyen.

or, si le système est mixing, on a par définition :

$$(2.29) \quad \lim_{T \rightarrow \infty} (a(T), A) = \langle a \rangle \langle A \rangle = 0 ,$$

puisque  $\langle A \rangle = 0$ . Comme l'on a également  $(a, A) = \left[ a, \frac{da}{dt} \right]$   
 $= \frac{1}{2} \left\langle \frac{da^2}{dt} \right\rangle = 0$ , il vient d'après (2.28) :

$$(2.30) \quad \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T (A(t), A) dt = 0 .$$

On en conclut que les coefficients de transport définis par les formules de Green-Kubo sont *nuls*, si le système est *fini* et *mixing*. En vertu du théorème de Sinai, il en est ainsi notamment pour le modèle dit de Boltzmann-Gibbs (système constitué de  $N$  sphères dures, avec  $N$  *fini*) dont on connaît l'importance en théorie cinétique des gaz ; en particulier, d'après (2.27), le coefficient de diffusion  $D$  d'un tel système est nul puisque  $v_{1x}$  et  $q_{1x}$  sont de carré sommable dans le cas d'un système fini.

L'argument précédent montre clairement que la propriété de mixing est à elle seule insuffisante pour rendre compte des propriétés dissipatives d'un système macroscopique. Dans le cas d'un système fini, elle permet seulement de décrire un aspect de l'irréversibilité macroscopique, celui qui est lié à la décroissance des corrélations au cours du temps ; par contre, l'aspect dissipatif des phénomènes macroscopiques échappe à cette description, si l'on ne tient pas compte du caractère macroscopique du système. Pour obtenir des effets dissipatifs non nuls, il faut nécessairement considérer la limite des "grands systèmes"  $N \rightarrow \infty$ , en prenant la limite thermodynamique des fonctions d'autocorrélation *avant* d'effectuer l'intégration temporelle ; les coefficients de transport sont alors définis par des expressions de la forme ( $\lim_{th} \equiv$  limite thermodynamique) :

$$(2.31) \quad \lim_{T \rightarrow \infty} \int_0^T \lim_{th} (A(t), A) dt .$$

Dans ce cas en effet, l'argument précédent ne s'applique pas car les fonctions du type  $a$  (telle que  $q_{1x}$ ) ne sont plus nécessairement de carré sommable ; on ne peut donc pas conclure

à la validité de (2.29), même si l'on a  $\langle A, A \rangle \rightarrow 0$  pour  $A \in L_2(r, \mu_0)$ , de sorte que la corrélation  $(a(t), A)$  peut tendre vers une valeur différente de zéro pour  $T \rightarrow \infty$ .

Pour obtenir des résultats *rigoureux* dans la théorie linéaire du transport, on est ainsi amené à prouver d'abord *l'existence* des expressions du type (2.31) où intervient la limite thermodynamique des fonctions de corrélation. Comme les deux passages à la limite considérés doivent être nécessairement effectués dans l'ordre indiqué (sous peine de retomber sous le coup de l'argument de Lebowitz), on voit que la théorie de Green-Kubo fournit un exemple de la situation évoquée au paragraphe précédent, dans laquelle le passage à la limite  $N \rightarrow \infty$  doit précéder l'étude de la limite temporelle  $T \rightarrow \infty$  ; on ne peut donc établir cette théorie sur des bases rigoureuses qu'en traitant les problèmes posés par la description de l'évolution temporelle de systèmes infinis (à la limite thermodynamique). Rappelons toutefois que la définition (2.31) des coefficients de transport ne vaut que pour des systèmes peu éloignés de l'état d'équilibre ; la formulation de Green-Kubo ne constitue donc qu'un aspect de la théorie des phénomènes de transport qui peut être également abordée dans le cadre de la théorie cinétique, comme nous le verrons dans la section suivante.

En conclusion, on remarquera que l'exemple précédent a permis non seulement de montrer le rôle fondamental de la limite thermodynamique dans ce problème de MSHE, mais aussi de mettre en lumière deux aspects distincts de l'irréversibilité, auxquels correspondent deux types d'évolution : d'une part, les processus d'uniformisation (ou de "mélange de phases") dans  $r$ , qui ne produisent pas d'entropie ; d'autre part, les processus qui donnent lieu à une certaine dissipation (à l'échelle macroscopique), et auxquels se trouve toujours associée une production d'entropie. C'est naturellement ce second aspect de l'irréversibilité qui intéresse plus particulièrement la MSHE ; la distinction précédente, dont l'importance a été notamment soulignée par Balescu [20] (voir aussi Farquhar [19]), permet ainsi de mieux préciser le contenu physique et les conditions du passage de la description dynamique d'un système à sa description macroscopique.

### 3. Problèmes fondamentaux de la Mécanique statistique hors d'équilibre et description cinétique

3.1 Difficultés et Méthodes générales. Les analyses précédentes nous montrent que le statut de la MSE repose sur des bases claires et bien établies ; elles nous permettent aussi de mieux comprendre pour quelles raisons la MSHE rencontre des difficultés de principe beaucoup plus grandes que la MSE. En effet, dans les situations d'équilibre, on est seulement concerné par le comportement *asymptotique* du système lorsque  $t \rightarrow \infty$  ; il suffit donc d'admettre que le système possède des propriétés ergodiques, pour être en mesure de justifier l'utilisation des ensembles stationnaires (ou mesures invariantes) microcanonique et canonique, en accord avec les prescriptions de Gibbs. De plus, l'état d'équilibre est unique et la description thermodynamique est obtenue par un procédé bien déterminé, celui du passage à la limite thermodynamique.

Par contre, les états hors d'équilibre sont par nature très variés, et à chacun d'eux correspondent un ou plusieurs phénomènes de transport particuliers. Comme l'on est intéressé dans ce cas à l'évolution *instantanée* du système, les propriétés d'ergodicité ou même de mixing ne suffisent pas, à elles seules, pour déterminer quel ensemble statistique doit être associé à une certaine situation physique. De ce fait, on ne dispose pas en MSHE de règles générales permettant de construire sans ambiguïté les ensembles statistiques qui doivent être associés à des états hors d'équilibre. Du point de vue des principes généraux de la Mécanique statistique, l'évolution des ensembles de systèmes hors d'équilibre est décrite par l'équation de Liouville (2.6), qui permet de calculer la densité en phases à  $N$  particules\* à l'instant  $t$ ,  $\rho_t^{(N)}(P)$ , à partir de la densité initiale  $\rho_0^{(N)}(P)$ . Ainsi que nous l'avons déjà vu (cf. §§ 2.2 et 2.3), les hypothèses de nature statistique ne peuvent intervenir que dans  $\rho_0^{(N)}(P)$  dont le choix comporte un grand arbitraire. Il y a là une première difficulté qui demanderait une étude approfondie de la

\* A partir de maintenant, nous mentionnerons toujours par un indice supérieur ou inférieur le nombre de particules dont dépend la fonction considérée.

notion de "préparation" du système dans un état donné. Une telle étude sortant du cadre de cet article, nous nous bornerons à souligner que le choix d'une densité initiale  $\rho_0^{(N)}(P)$ , supposée généralement assez "régulière", implique déjà un certain processus de moyenne par rapport à l'état microscopique exact du système, processus dont la justification met en jeu les propriétés d'ergodicité et de mixing. Cette remarque étant faite, nous adopterons toujours dans ce qui suit le point de vue de la Mécanique statistique, en acceptant comme "notion première" la donnée d'une certaine densité en phase  $\rho_0^{(N)}(P)$ . En revenant alors au problème de la construction d'ensembles statistiques hors d'équilibre, il nous faut insister sur deux autres difficultés de principe, l'une étant liée au problème de l'irréversibilité, et l'autre à la définition des grandeurs macroscopiques.

-a- Irréversibilité et "coarse-graining". La première de ces difficultés tient au fait que les ensembles hors d'équilibre devraient permettre de décrire l'évolution irréversible et dissipative constatée à l'échelle macroscopique ; or, à l'échelle microscopique, l'évolution du système obéit aux lois de la Mécanique classique qui sont réversibles\* et présentent des propriétés de "réurrence" (temps de retour de Poincaré pour les systèmes finis). On a donc à concilier la description macroscopique du système, caractérisée par des lois irréversibles, avec le modèle microscopique sous-jacent, déterministe et réversible ; c'est le problème fondamental posé par l'interprétation de l'irréversibilité macroscopique. On sait que les difficultés de ce problème ont été illustrées par deux paradoxes bien connus et longuement discutés, que nous nous bornerons à rappeler ici : le paradoxe de Loschmidt (lié à la réversibilité), et celui de Zermelo (résultant de la propriété de réurrence). Cette propriété de réversibilité se retrouve naturellement dans l'équation de Liouville ; en effet, celle-ci étant une conséquence des équations du mouve-

\* En ce sens que si  $\{\vec{r}_i(t), \vec{p}_i(t)\}$  est une solution de (2.1), il en est de même pour le mouvement inverse  $\{\vec{r}_i(-t), -\vec{p}_i(-t)\}$ .

ment, l'évolution temporelle  $\rho_0^{(N)}(P) + \rho_t^{(N)}(P)$  est elle-même réversible et déterministe et apparaît ainsi inconciliable avec les lois de la physique macroscopique. On peut toutefois échapper à cette contradiction en remarquant que la densité en phase  $\rho_t^{(N)}(P)$  représente la description "maximale", c'est-à-dire la plus complète possible (au sens de la Mécanique statistique), de l'état statistique d'un système à N-particules ; son évolution au cours du temps décrit donc un processus microscopique beaucoup trop détaillé par rapport aux données de l'observation macroscopique qui ne portent que sur un petit nombre de variables.

Pour tenir compte de ce fait, on a recours au procédé bien connu de "granulation" ou "coarse-graining" qui peut être défini de diverses manières ; il consiste en général à considérer une certaine partition de l'espace des phases (ou de l'ensemble des valeurs possibles d'une grandeur) en cellules (ou en intervalles) "macroscopiques", dont les dimensions sont liées à l'ordre de grandeur des imprécisions inhérentes à toute mesure macroscopique. On admet alors que l'observateur peut seulement distinguer les états du système appartenant à différentes cellules (ou intervalles) et que, par conséquent, les états correspondant à une même cellule (ou à un même intervalle) ne sont pas discernables à l'échelle macroscopique. Cette définition de l'observation macroscopique conduit à introduire des quantités *semi-fines* (coarse-grained), qui sont obtenues en prenant la moyenne des quantités "fines" correspondantes sur tous les états d'une même cellule (ou d'un même intervalle). Le procédé de "coarse-graining" ainsi défini joue un rôle central dans les raisonnements de la MSHE : en effet, il est aisé de voir que les quantités semi-fines ne satisfont généralement pas à l'équation de Liouville et que leur évolution temporelle est différente de celle des quantités fines correspondantes ; il apparaît donc possible, sous certaines conditions, d'éviter les paradoxes mentionnés ci-dessus et d'obtenir une évolution irréversible pour ces quantités semi-fines. L'application de ce procédé rencontre toutefois une difficulté importante : elle tient à ce que la définition des cellules macroscopiques peut être envisagée de bien des manières différentes et qu'elle comporte de ce fait

une large part d'arbitraire ; celle-ci ne pourra être réduite qu'en procédant à une étude plus approfondie de la nature des variables macroscopiques.

-b- Variables macroscopiques et description cinétique. La seconde difficulté de principe évoquée plus haut concerne justement ce problème ; elle tient à une certaine indétermination dans le choix de la description macroscopique adéquate et notamment dans la définition des fonctions de phase qui peuvent être associées aux diverses mesures macroscopiques. Sans entrer dans une analyse complète de ce problème, (pour un exposé détaillé, voir par exemple Penrose [3], et les références de cet article), il est important de notre point de vue de remarquer que l'état macroscopique d'un système peut être défini pour *différentes* échelles (de temps et d'espace), auxquelles correspondent des *régimes* particuliers de l'évolution qui caractérisent le "*niveau de description*" considéré (cf. Grad [21]). Par exemple, les grandeurs les plus directement accessibles à notre expérience sont les variables hydrodynamiques locales qui décrivent les propriétés du système à notre échelle (macroscopique) ; elles satisfont aux lois de la Mécanique des fluides, qui caractérisent le *régime hydrodynamique* et permettent de formuler dans le cas dissipatif une théorie phénoménologique du transport qui recouvre les définitions usuelles des coefficients de transport (Thermodynamique des processus irréversibles). Toutefois, on conçoit que le passage direct de l'évolution microscopique exacte d'un système à N particules au régime hydrodynamique (comportant seulement 5 variables dans le cas d'un fluide simple) soulève des problèmes très difficiles, tels que ceux discutés dans l'exemple du paragraphe 2.6.

Aussi est-il nécessaire de considérer des définitions plus fines de l'état macroscopique et d'étudier l'évolution du système à des "*niveaux intermédiaires*", correspondant à des descriptions plus profondes que celle mise en jeu dans le régime hydrodynamique mais cependant beaucoup moins détaillées que la description "maximale" avec la densité à N particules  $\rho_t^{(N)}(P)$ . L'état du système à de tels "niveaux" est décrit par des variables (ou des fonctions de distribution) dites "semi-fines" ou "macroscopiques" ; comme ce dernier ter-

me désigne aussi bien les variables du niveau hydrodynamique que celles décrivant les différents "niveaux intermédiaires", son usage donne souvent lieu dans la littérature à de sérieuses ambiguïtés ; dans ce qui suit, nous l'emploierons également (avec des guillemets) dans ces divers sens, en nous rappelant qu'il faut préciser à chaque fois à quel niveau de description il se rapporte. Nous ne pouvons analyser ici toutes les méthodes qui ont été développées pour traiter ces problèmes ; il nous suffira pour la suite de l'exposé d'indiquer que celles-ci mettent toutes en oeuvre, de manière plus ou moins explicite, un certain procédé de "coarse-graining" et qu'elles peuvent être classées "grosso-modo" en deux groupes principaux qui ne sont d'ailleurs pas indépendants :

α) d'une part les méthodes fondées sur la définition préalable d'observables "semi-fines" qui sont obtenues par divers procédés de "coarse-graining". La théorie cinétique des gaz se rattache à ce type de méthodes (cf. § 3.3). Il convient également de mentionner celles où les observables choisies sont les fonctions de phase associées aux grandeurs macroscopiques effectivement observées ; leur intérêt tient à ce que l'évolution de ces fonctions de phase peut être décrite, au moyen d'opérateurs de projection convenablement choisis, par des équations exactes qui constituent une généralisation formelle (linéaire ou nonlinéaire) de l'équation de Langevin (Méthodes de Zwanzig [22], Mori [23], Garcia-Colin et del Rio [24,25], etc.). A ce niveau de description, appelé parfois "mésoscopique" (Garcia-Colin), l'application des méthodes de la Mécanique statistique conduit alors à décrire l'évolution du système par des formes plus ou moins généralisées de l'équation de Fokker-Planck (équations maîtresses ou "Master-Equations" généralisées), d'où il faut ensuite déduire les équations valables à l'échelle macroscopique proprement dite (régime hydrodynamique).

β) d'autre part, les méthodes de type cinétique, où l'on étudie d'abord l'évolution des densités de probabilité fines  $\rho_t^{(N)}(P)$  en s'efforçant de développer toutes les conséquences de l'équation de Liouville : on s'intéresse particulièrement à l'évolution des fonctions de distribution réduites

$\rho_s^{(N)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_s; t)$  relatives aux "essaims" de  $s$ -particules ( $1 \leq s \leq N$ ) obtenus en groupant entre elles, de toutes les manières possibles, les  $N$  particules du système. On aboutit ainsi aux équations de la "hiérarchie BBGKY" (cf. § 3.2b), équivalentes dans leur ensemble à l'équation de Liouville, où sont impliqués à la fois des processus *lents* et des processus *rapides* correspondant à plusieurs échelles de temps (et d'espace) caractéristiques. Dans le cas des fluides faiblement denses, on peut alors établir, sous certaines conditions, l'existence d'un *régime cinétique* dans lequel l'évolution du système ne dépend que de la fonction de distribution à une particule  $\rho_1(\vec{x}_1; t)$  ; l'évolution temporelle de  $\rho_1(\vec{x}_1; t)$  est une évolution "*lente*" (par rapport aux échelles microscopiques) et elle est déterminée par une certaine *équation cinétique* qui peut être "extraite" des solutions générales de la hiérarchie ; tel est le cas, par exemple, de la célèbre équation de Boltzmann, valable pour des fluides très dilués\*. La définition de ce "niveau de description cinétique" implique en fait un certain "coarse-graining" spatial et temporel, où les échelles caractéristiques mises en jeu sont la portée  $r_0$  du potentiel d'interaction et le temps d'interaction  $t_c = r_0/\bar{v}$  ( $\bar{v}$  : vitesse moyenne thermique) que l'on suppose petits par rapport au libre parcours moyen  $\lambda$  (l.p.m.) et au temps de libre parcours  $t_0 = \lambda/\bar{v}$ , respectivement. Il est d'ailleurs intéressant de souligner ici les importantes différences existant entre ce "coarse-graining" et les procédés évoqués au paragraphe précédent ; en effet, dans les méthodes de (α), le "coarse-graining" est mis en oeuvre dès le début du raisonnement et sert à la définition plus ou moins arbitraire des "variables macroscopiques" ; par contre, dans la description cinétique, le "coarse-graining" porte sur le temps et l'espace physique et doit résulter en principe des propriétés des solutions de la hiérarchie ; de ce point de vue, la fonction de distribution  $\rho_1(\vec{x}_1; t)$  joue ici le rôle de "variable macroscopique", dans la mesure où elle est solution d'une équation cinétique dont les échelles caractéristiques sont  $\lambda$  et  $t_0$ . Quant à la description hydrodynamique, on l'obtient en effec-

\*Rappelons que cette équation a été initialement établie dans le cadre de la théorie cinétique des gaz, selon un procédé qui s'apparente aux méthodes de α) (cf. § 3.3).

tuant sur l'équation cinétique un nouveau changement d'échelles d'espace et de temps ; les variables hydrodynamiques étant définies comme les premiers moments (par rapport à la vitesse) de la fonction de distribution  $\rho_1(x, t)$ , on peut en effet montrer que les équations du régime hydrodynamique sont à leur tour des solutions particulières de l'équation cinétique (solutions "normales" de Hilbert-Enskog-Chapman), pour les échelles d'espace  $L$  ( $\gg \lambda$ ) et de temps  $T$  ( $\gg t_0$ ) qui caractérisent le comportement du fluide à cette échelle (cf. § 3.2c). On conçoit que la justification rigoureuse de ces méthodes soulève des problèmes mathématiques difficiles ; c'est à l'examen de quelques-uns de leurs aspects qu'est consacrée la suite de cet exposé, où nous nous plaçons exclusivement dans le cadre des théories cinétiques.

-c- Descriptions réduites autonomes. Les considérations précédentes nous conduisent ainsi à distinguer en MSHE plusieurs "niveaux de description" d'un même système ; ces "niveaux" sont caractérisés par différents régimes d'évolution, et l'on passe de l'un à l'autre par un changement d'échelles approprié ; par exemple, on considère dans la hiérarchie BBGKY les trois "niveaux de description" microscopique, cinétique et hydrodynamique, auxquels correspondent les échelles de temps et d'espace  $(t_c, r_0)$ ,  $(t_0, \lambda)$  et  $(T, L)$  respectivement. Bien que les méthodes mises en oeuvre à ces divers niveaux soient très variées, elles présentent cependant un point commun important : ce sont toutes des "descriptions réduites" de l'état du système, dans lesquelles n'est utilisée qu'une très faible partie de l'information complète, ou "maximale" (au sens de la MSHE), contenue dans la densité de probabilité à  $N$  particules  $\rho_t^{(N)}(p)$ . Ces descriptions réduites, qui sont formulées en termes de variables "semi-fines" (ou "macroscopiques"),\* sont donc très "incomplètes" par rapport à la description maximale, en ce sens qu'à une situation "macroscopique" donnée correspond toujours un très grand nombre d'états microscopiques possibles, compatibles avec la même

\* Rappelons que nous utilisons le terme "macroscopique" au sens large indiqué ci-dessus ; c'est-à-dire qu'il désigne toute description "réduite" par rapport à la description maximale microscopique.

observation macroscopique. Comme l'évolution dynamique du système dépend de toutes les variables microscopiques, il est clair que la connaissance de l'état "macroscopique" initial ne suffit pas pour déterminer l'état "macroscopique" ultérieur ; il s'ensuit que l'évolution des variables "macroscopiques" n'est pas autonome (Lanford [26]).

Pour obtenir une "description réduite autonome" où ne figurent que les seules variables "macroscopiques", il faut que l'effet des variables microscopiques non observées puisse être exprimé en fonction des variables "macroscopiques" elles-mêmes. Ceci ne peut être réalisé que "statistiquement", en tenant compte de l'extrême complexité des interactions élémentaires due au très grand nombre de variables microscopiques. Le passage à une description réduite autonome implique donc nécessairement une *hypothèse de nature statistique*, qui porte sur la contribution "macroscopique" des interactions entre variables microscopiques. C'est naturellement par de telles hypothèses que peuvent être introduites l'irréversibilité et la dissipativité à l'échelle macroscopique ; comme elles mettent en jeu les mécanismes de l'évolution instantanée du système, elles peuvent entrer en conflit avec les équations du mouvement et demandent donc à être justifiées sur des bases rigoureuses. L'exemple le mieux connu d'une telle description réduite autonome nous est fourni par la description cinétique définie ci-dessus, où l'évolution du système est déterminée par une équation cinétique ne portant que sur la fonction de distribution réduite  $\rho_1(x_1, t)$  (régime cinétique). Dans le cas particulier des gaz dilués, la théorie repose sur la célèbre hypothèse du "chaos moléculaire" qui est à la base de la déduction de l'équation de Boltzmann ; rappelons que la nature statistique de cette hypothèse s'est dégagée progressivement des longues controverses relatives au *théorème H* (paradoxes de Loschmidt et de Zermelo, évoqués en -a-).

En conclusion, deux ingrédients apparaissent nécessaires pour développer la Mécanique statistique des systèmes hors d'équilibre : i) un certain processus de "réduction" du nombre des variables qui aboutit à une description réduite ou "macroscopique" de l'état du système ; ii) la formulation d'une hypothèse de nature statistique, nécessaire pour obtenir une évolution autonome en termes des seules variables "rédui-

tes", cette évolution étant irréversible. Comme toute description réduite est incomplète par nature, on peut prévoir l'existence de fluctuations du système par rapport à l'état "macroscopique", celles-ci étant d'ailleurs nécessaires pour "réconcilier" l'irréversibilité macroscopique avec la réversibilité dynamique ; toutefois, pour que la description macroscopique utilisée soit adéquate, il faut naturellement que la valeur relative de ces fluctuations reste petite au cours de l'évolution.

Ainsi se trouvent précisées, pour la théorie des systèmes hors d'équilibre, les conditions générales de la description de l'état d'un système en Mécanique statistique qui ont été esquissées au paragraphe 2.1 : elles conduisent à concevoir l'évolution du système comme résultant de deux contributions : l'une est déterminée par la variation "lente" des variables "macroscopiques" et correspond en fait au comportement "le plus probable" du système ; l'autre est un terme de fluctuations dû aux mouvements rapides et désordonnés qui révèlent la structure microscopique sous-jacente. Du point de vue des techniques mathématiques, il est intéressant de signaler qu'une telle décomposition se prête à la mise en oeuvre du formalisme des opérateurs de projection ; celui-ci est notamment l'outil de base des méthodes utilisées pour décrire l'évolution des fonctions de phase associées aux diverses grandeurs macroscopiques (cf. § b.a) ; dans ce cas, l'effet "macroscopique" des variables microscopiques non observables est exprimé par une "fonction de mémoire", sur laquelle doivent porter les hypothèses de nature statistique permettant d'aboutir à une description autonome de l'état du système. Pour ce qui concerne la description cinétique qui nous intéresse ici plus particulièrement, la "réduction" de la description résulte d'un procédé différent et moins formel, qui permet en fait de préciser le contenu réel des méthodes fondées sur la définition d'opérateurs de projection ; ainsi que nous l'avons vu précédemment (cf. § b.8), ce procédé consiste en effet à tenter de *déduire*, à partir des propriétés intrinsèques des équations de la hiérarchie, la réduction de la description maximale (avec la densité de probabilité à  $N$  particules) à une description cinétique qui ne dépend que de la seule fonction de distribution réduite à une particule  $\rho_1(\vec{x}_1; t)$  ; de ce point de vue, on peut dire que ce processus de "réduction" revient à "projeter" les solutions générales de la hiérarchie sur les solutions de l'équation cinétique.

-d- Processus limites. Les analyses précédentes montrent que le problème central de la MSHE est de justifier de manière *rigoureuse* les hypothèses statistiques nécessaires à la déduction d'une évolution "macroscopique" autonome ; en effet, en l'absence d'une telle justification, ces hypothèses se présentent comme des approximations plus ou moins bien définies qui peuvent devenir incompatibles avec l'évolution dynamique sous-jacente. De manière plus précise, on voit que ce problème comporte deux aspects : d'une part, établir l'existence d'un certain régime d'évolution "macroscopique" (comme le régime cinétique), d'autre part, prouver que les fluctuations du système par rapport à cet état "macroscopique" restent très petites en valeur relative durant toute l'évolution. Comme dans le cas de l'équilibre, de tels résultats ne peuvent être obtenus qu'en effectuant des passages à la limite appropriés, dans lesquels on doit d'abord tenir compte du caractère macroscopique du système ; on est donc conduit à considérer de nouveau la limite  $N \rightarrow \infty$ , afin d'être en mesure d'appliquer le théorème limite fondamental du calcul des probabilités.

Cependant, le passage à la limite des "grands systèmes" (ou limite thermodynamique définie en 2.5) n'est pas bien adapté au cas de systèmes hors d'équilibre ; en effet, ce procédé permet seulement l'évaluation asymptotique de grandeurs qui ne dépendent pas de la forme ou des dimensions du système (comme les grandeurs globales de la Thermodynamique), et ne vaut de ce fait que pour des systèmes spatialement uniformes (cf. Mori [27]). Il en est autrement en MSHE où l'on a généralement affaire à des situations non-uniformes, et où l'on s'intéresse à l'évolution instantanée du système. Dans ce cas, les passages à la limite mis en oeuvre doivent dépendre des paramètres microscopiques qui interviennent dans les lois du mouvement (essentiellement la portée  $r_0$  et l'ordre de grandeur  $\lambda$  du potentiel d'interaction), ainsi que des grandeurs qui caractérisent le niveau de description considéré. Ils seront en fait déterminés de manière à satisfaire aux lois qui gouvernent les changements d'échelle d'un niveau de description à un autre, ce qui conduit à prévoir des règles de transformation différentes pour les quantités macroscopiques et microscopiques.

Considérons par exemple le cas de la description cinétique, où la longueur caractéristique est le libre parcours moyen  $\lambda$ . Dans le régime cinétique, le rapport  $\lambda/L$  est petit mais doit demeurer fini\*, car la limite  $\lambda/L \rightarrow 0$  caractérise le régime hydrodynamique. Si l'on effectue alors le passage à la limite  $N \rightarrow \infty$  en maintenant fini le l.p.m., les dimensions macroscopiques du système doivent aussi rester inchangées, de sorte que la densité numérique  $n = N/V(\Lambda)$  devient elle-même infinie. Comme l'on a approximativement  $\lambda = 1/n\sigma^2$  pour un fluide de sphères dures de diamètre  $\sigma$ , on voit que  $\lambda$  ne restera fini que si  $\sigma \rightarrow 0$ , de telle manière que  $n\sigma^2 = \text{cte}$  lorsque  $n \rightarrow \infty$ ; comme l'on a par contre  $n\sigma^3 \rightarrow 0$ , on voit que la limite ainsi définie correspond au cas d'un fluide idéal dans lequel le volume relatif occupé par les particules (ou la densité "sans dimension"  $n\sigma^3$ ) tend vers zéro, bien que la densité numérique  $n$  devienne infinie. C'est la limite de Boltzmann-Grad dont l'importance a été mise en évidence par Grad [28]: elle permet d'établir sur des bases rigoureuses l'équation de Boltzmann, qui décrit un régime cinétique dans lequel les phénomènes de transport sont uniquement dus aux collisions binaires (comme  $\lambda$  reste fini, celles-ci donnent effectivement des contributions finies, bien que les autres aspects "granulaires" de la matière disparaissent asymptotiquement). A cette limite, l'évolution du système vérifie exactement l'équation cinétique de Boltzmann, sans terme de fluctuations: dans le cas d'un système réel (dont l'état est voisin de celui d'un fluide idéal) cette équation décrit seulement l'évolution la plus probable, à laquelle s'ajoute de petites fluctuations qui s'évanouissent à la limite. Remarquons aussi que ce passage à la limite consiste bien à transformer de manière différente les longueurs "macroscopiques" et "microscopiques"; en effet, alors que restent inchangées les longueurs "macroscopiques", d'un ordre de grandeur comparable au l.p.m., les longueurs microscopiques de l'ordre du diamètre moléculaire (ou de la portée du potentiel d'interaction)

\*Rappelons que  $L$  représente la longueur caractéristique au niveau hydrodynamique.

deviennent des quantités évanescentes\*.

Comme les situations physiques en théorie hors d'équilibre sont très variées, on est naturellement amené à envisager différents types de limites; il faudrait en fait pouvoir associer un passage à la limite bien défini à chaque situation considérée. Cela ne semble toutefois réalisable que dans certains cas, comme le montrent par exemple les difficultés de la théorie cinétique en milieu modérément dense (cf. § 3.2c): pour de tels systèmes en effet, le paramètre caractéristique est la densité sans dimension  $n\sigma^3$  qui doit alors rester finie, ainsi d'ailleurs que le rapport  $\lambda/L$ ; on a donc affaire dans ce cas à un régime cinétique différent de celui de Boltzmann-Grad, intermédiaire entre la description "maximale" et celle du fluide idéal, pour lequel aucun passage à la limite ne semble propre à justifier les diverses équations qui ont été proposées pour ces systèmes. Bien que la suite de cet exposé porte pour l'essentiel sur l'étude de la limite de Boltzmann-Grad, nous considérerons également deux autres passages à la limite pour lesquels des résultats importants ont été obtenus: (i) la limite du couplage faible (van Hove), dans laquelle on fait tendre l'ordre de grandeur  $\lambda$  du potentiel d'interaction vers zéro et la durée d'observation vers l'infini, de telle manière que  $\lambda^2 t = \text{cte}$  si  $\lambda \rightarrow 0$  et  $t \rightarrow \infty$ ; elle correspond au cas où l'évolution est déterminée par de nombreuses mais très petites collisions, qui donnent une contribution finie pour des durées suffisamment longues; (ii) la limite du champ moyen (ou régime de Debye) définie par les conditions  $N \rightarrow \infty$ ,  $\lambda \rightarrow 0$ ,  $N\lambda = \text{cte}$ ; elle permet de décrire les contributions finies (effets collectifs) dus à un faible potentiel de très longue portée, et joue de ce fait un rôle essentiel en théorie des plasmas, notamment dans la déduction rigoureuse de l'équation de Vlasov (cf. section 4).

Les caractères propres aux passages à la limite de

\*Signalons que le cas du fluide idéal peut être également traité avec d'autres changements d'échelle, dans lesquels ce sont les longueurs microscopiques qui restent fixées, alors que les longueurs macroscopiques deviennent infinies (cf. Tokuyama et Mori [29] et Morita, Mori et Tokuyama [30]).

la MSHE étant ainsi précisés, il reste à déterminer sous quelles conditions peuvent être effectivement obtenues les équations relatives à une description "macroscopique" autonome. A cet effet, on ne peut s'appuyer en MSHE que sur l'équation de Liouville, en vertu de laquelle la densité en phase à  $N$  particules  $\rho_t^{(N)}(P)$  est en principe bien déterminée, dès que l'on se donne la densité en phase initiale  $\rho_0^{(N)}(P)$ . Il s'ensuit que les seules hypothèses de nature statistique, compatibles avec la dynamique sous-jacente, ne peuvent porter que sur  $\rho_0^{(N)}(P)$  : une fois choisie cette donnée initiale, la densité en phase  $\rho_t^{(N)}(P)$  s'en déduit par un mécanisme déterministe.

La suite de cet article sera donc consacrée à l'étude du problème suivant : déterminer les conditions nécessaires et suffisantes qui doivent être remplies par les densités en phase *initiales*, pour que les passages à la limite définis ci-dessus permettent de déduire rigoureusement de l'équation de Liouville des équations décrivant le comportement du système à un certain niveau "macroscopique". D'après les raisonnements précédents, ces conditions ont à satisfaire à deux exigences : d'une part, permettre la définition de variables "macroscopiques" dont la dispersion devient *nulle* à une certaine limite ; d'autre part, être telles que cette dernière propriété soit *conservée* au cours du temps, de sorte que l'évolution du système devienne autonome à cette limite, c'est-à-dire s'exprime en fonction de ces seules variables "macroscopiques".

A titre d'exemple, revenons au cas de la théorie cinétique : on sait que la propriété (ou hypothèse) de *chaos moléculaire* est nécessaire pour établir *formellement* l'équation de Boltzmann et qu'elle doit être vérifiée à *chaque* instant de l'évolution (cf. § 3.3) ; elle peut donc entrer en contradiction avec les lois dynamiques sous-jacentes, d'où l'apparition possible de paradoxes. Par contre, cette propriété peut être postulée à l'instant initial sans risque de contradiction, mais elle n'est alors *pas* conservée au cours du temps si le système est fini, en vertu même de l'équation de

Liouville. Pour fonder l'équation de Boltzmann sur une base rigoureuse, il faut donc montrer que la propriété de chaos moléculaire est *conservée* au cours du temps à la *limite* de Boltzmann-Grad, et que cette propriété permet en outre de définir des grandeurs sans dispersion : c'est l'objet du théorème de Lanford (cf. Section 4).

En conclusion, on voit que la déduction de résultats rigoureux en MSHE implique la double démarche suivante : d'abord, rechercher s'il est possible de caractériser une situation physique donnée par un passage à la limite approprié ; ensuite, établir les conditions nécessaires et suffisantes qui doivent être satisfaites à cette limite par la densité initiale  $\rho_0^{(N)}(P)$  pour qu'une description réduite autonome puisse être obtenue. Or, du point de vue de l'interprétation stochastique de la Mécanique statistique (cf. § 2.1), la densité en phase  $\rho_0^{(N)}(P)$  définit dans l'espace  $\Gamma$  un processus stochastique non stationnaire ; en passant à la limite, on obtient donc un certain *processus limite* dont les lois peuvent être rigoureusement *déduites* de l'équation de Liouville. On en conclut que la déduction de résultats rigoureux en MSHE passe par la démonstration de *théorèmes limites* établissant l'existence des processus limites qui peuvent être associés aux diverses situations physiques considérées. Ces processus sont généralement *markoviens*, comme le montrent les exemples tirés de la théorie cinétique (modèle de Lorentz, gaz de Boltzmann, mouvement brownien, etc.) où les limites markoviennes jouent un rôle essentiel (analysé en profondeur par Spohn [4]). Les équations vérifiées par ces processus possèdent pour la plupart\* les propriétés d'irréversibilité et de dissipativité propres au domaine macroscopique ; elles décrivent *exactement* l'évolution du système à la limite considérée, en termes de variables "macroscopiques" (ou semi-fines) de dispersion nulle ; dans le cas des systèmes physiques réels, dont l'état est seulement voisin des conditions limites, elles représentent

\*Cette réserve concerne essentiellement l'équation de Vlasov correspondant à la limite du champ moyen (cf. chapitre 4).

alors l'évolution la plus probable du système, à laquelle s'ajoutent de petites fluctuations qui tendent vers zéro à la limite.

La démonstration de l'existence de tels processus limites joue donc un triple rôle ; elle permet : (i) de décrire l'état du système au moyen de variables "semi-fines" ou "macroscopiques" significatives, construites à partir du modèle microscopique ; (ii) de déduire des principes de base les équations (généralement irréversibles) vérifiées par ces variables ; (iii) enfin, de déterminer les propriétés et l'effet des fluctuations au niveau de description considéré. Cette notion de processus limite est donc essentielle pour la justification des méthodes de la MSHE : elle permet notamment de concevoir comment l'évolution macroscopique irréversible peut résulter asymptotiquement des propriétés intrinsèques d'un modèle mécanique, réversible et déterministe ; de ce point de vue, l'irréversibilité apparaît comme une propriété limite attachée à une description "réduite" (ou incomplète) de l'état d'un système dynamique.

Ces méthodes générales conduisent à envisager des suites infinies de systèmes finis et jouent donc en MSHE un rôle équivalent à celui de la limite thermodynamique dans la théorie des systèmes à l'équilibre. Elles peuvent d'ailleurs s'appliquer à tous les niveaux de description "macroscopiques" (cinétique, hydrodynamique, ...) moyennant des adaptations convenables. En particulier, le passage à la limite  $1/L \rightarrow 0$  permet de déduire les équations du régime hydrodynamique à partir de la description cinétique ; on peut ainsi obtenir une formulation cinétique de la théorie des coefficients de transport qui résulte de deux processus de "réduction" successifs à partir de la description "maximale" (l'un s'exerçant d'abord au niveau microscopique et l'autre au niveau cinétique) ; remarquons en passant que ce formalisme aboutit à une définition cinétique des coefficients de transport qui échappe aux problèmes mathématiques de la théorie de Green-Kubo, relatifs à l'évolution temporelle de systèmes infinis. La suite de cet article est essentiellement consacrée à l'application de ces méthodes au "niveau cinétique", notamment à l'exposé des principaux *théorèmes limites* qui ont été récemment démontrés dans

ce domaine. Nous considérons les limites de Boltzmann-Grad, du couplage faible et du champ moyen qui permettent d'établir sur des bases rigoureuses un certain nombre d'équations cinétiques bien connues (équations de Boltzmann, de Fokker-Planck, de Vlasov, ...), qui avaient été obtenues au moyen d'hypothèses heuristiques et de méthodes approchées. A cet effet, il nous faut au préalable indiquer les grandes lignes du formalisme de la hiérarchie B.B.G.K.Y et de la théorie cinétique des gaz, ce qui nous donnera l'occasion d'illustrer concrètement les considérations générales de ce paragraphe.

### 3.2. Hiérarchie B.B.G.K.Y\*

Le formalisme de la hiérarchie fournit un cadre approprié pour traiter le problème de la "réduction" de la description d'un système du niveau "maximal" au niveau "cinétique" ; il repose sur la définition des fonctions de distribution réduites à partir de la densité en phase à N particules  $\rho_t^{(N)}(P)$ .

a. Fonctions de distribution réduites. Elles s'introduisent naturellement si l'on remarque que la plupart des grandeurs dynamiques (ou fonctions de phase) correspondant aux observables macroscopiques usuelles admettent une expression fonctionnelle particulièrement simple : ce sont soit des sommes de fonctions à une particule, de la forme

$$(3.1) \quad A(P) \equiv A(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = \sum_{i=1}^N A_1(\vec{x}_i),$$

soit des sommes de fonctions à deux particules, telles que :

$$(3.2) \quad A(P) = \sum_{i < j=1}^N \sum A_2(\vec{x}_i, \vec{x}_j),$$

où les  $A_1(\vec{x}_i)$  désignent une même fonction des différentes variables  $\vec{x}_i$ , et de même pour  $A_2$  (en vertu de la nécessaire symétrie de  $A(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N)$  ; cf. [20]). A titre d'exemples, citons l'énergie cinétique des particules :  $A(P) = \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N p_i^2$ , où l'on

\* Bogolioubov, Born et Green, Kirkwood, Yvon.

a d'après (3.1)  $A_1(\vec{x}_1) = p_1^2/2m$ , et l'énergie potentielle du système :  $A(P) \equiv V(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N) = \prod_{i < j=1}^N \phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ , où l'on a d'après (3.2)  $A_2(\vec{x}_i, \vec{x}_j) = \phi(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|)$ , dans le cas de particules ponctuelles interagissant par paires.

Si l'on considère alors les valeurs moyennes de telles fonctions de phase, il est aisé de voir d'après (2.9) qu'elles ne dépendent que des fonctions de distribution réduites  $\tilde{\rho}_1(\vec{x}_1; t)$  et  $\tilde{\rho}_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2; t)$  définies ci-dessous. En effet, en tenant compte de la symétrie de  $\rho_t^{(N)}(P) \equiv \rho_N(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N; t)$ , on a pour des fonctions du type (3.1) :

$$(3.3) \quad \bar{A}^\mu(t) = \sum_{i=1}^N \int_{\Gamma} A_1(\vec{x}_i) \rho_N(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t) d\Gamma \\ = N \int_{\Gamma} A_1(\vec{x}_1) \rho_N(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_N \\ = N \int_{\Lambda \times R^3} A_1(\vec{x}_1) \rho_1(\vec{x}_1; t) d\vec{x}_1,$$

où la fonction de distribution réduite spécifique à une particule

$$(3.4) \quad \rho_1(\vec{x}_1; t) = \int_{(\Lambda \times R^3)^{N-1}} \rho_N(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t) d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_N$$

est définie sur l'espace des phases à une particule  $\mu \equiv \Lambda \times R^3$ , pour tenir compte de l'indiscernabilité (au sens classique) des particules de même espèce, on introduit la fonction de distribution générique à une particule

$$(3.5) \quad \tilde{\rho}_1(\vec{x}_1; t) \equiv N \rho_1(\vec{x}_1; t),$$

avec laquelle la valeur moyenne (3.3) s'écrit :

$$(3.6) \quad \bar{A}^\mu(t) = \int_{\Lambda \times R^3} A_1(\vec{x}_1) \tilde{\rho}_1(\vec{x}_1; t) d\vec{x}_1;$$

remarquons que la fonction de distribution  $\tilde{\rho}_1(\vec{x}_1; t)$  ainsi définie représente le nombre probable de particules du système

contenues dans l'unité de volume de l'espace  $\mu_1$ , puisque  $\rho_1(\vec{x}_1; t)$  est par définition la densité de probabilité de la particule 1 dans  $\mu_1$ .

On a de même pour des fonctions du type (3.2) :

$$(3.7) \quad \bar{A}^\mu(t) = N(N-1) \int_{\Gamma} A_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \rho_N(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t) d\Gamma \\ = \int_{(\Lambda \times R^3)^2} A_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2) \tilde{\rho}_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2; t) d\vec{x}_1 d\vec{x}_2,$$

où l'on a introduit la fonction de distribution réduite à 2 particules :

$$(3.8) \quad \tilde{\rho}_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2; t) = N(N-1) \int_{(\Lambda \times R^3)^{N-2}} \rho_N(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t) d\vec{x}_3 \dots d\vec{x}_N \\ \equiv N(N-1) \rho_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2; t).$$

Dans le cas où les grandeurs dynamiques significatives sont toutes de la forme (3.1) ou (3.2), on constate ainsi que l'état macroscopique du système est entièrement déterminé, si l'on connaît les deux fonctions de distribution réduites  $\tilde{\rho}_1(\vec{x}_1; t)$  et  $\tilde{\rho}_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2; t)$ ; d'après leur définition même, il est clair que ces fonctions de distribution contiennent une information considérablement réduite par rapport à l'information maximale contenue dans  $\rho_N$  (processus de marginalisation).

Nous allons voir toutefois que cet avantage est difficile à exploiter, car l'évolution de  $\tilde{\rho}_1(\vec{x}_1; t)$  et  $\tilde{\rho}_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2; t)$  met en jeu toutes les fonctions de distribution réduites d'ordre supérieur et dépend finalement, à travers celles-ci, de l'évolution de  $\rho_N(P; t)$  déterminée par l'équation de Liouville. Cette remarque nous conduit à généraliser les définitions précédentes, en introduisant les fonctions de distribution réduites à  $s$  particules

$$(3.8) \quad \tilde{\rho}_s(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_s; t) = \frac{N!}{(N-s)!} \int_{(\Lambda \times R^3)^{N-s}} \rho_N(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t) d\vec{x}_{s+1} \dots d\vec{x}_N,$$

qui sont symétriques en  $\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_s$  et satisfont à la relation de normalisation :

$$(3.9) \int_{(\Lambda \times R^3)^s} \tilde{\rho}_s(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_s; t) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_s = \frac{N!}{(N-s)!} = N(N-1)\dots(N-s+1).$$

La représentation de l'état statistique du système par l'ensemble des fonctions  $\tilde{\rho}_s$  ( $1 \leq s \leq N$ ) est naturellement équivalente à celle définie par la fonction de distribution  $\rho_N$ ; il est parfois commode de considérer la suite complète de ces fonctions de distribution comme définissant formellement un seul vecteur à  $N+1$  dimensions :

$$(3.10) \tilde{\rho} \equiv \{\tilde{\rho}_0, \tilde{\rho}_1, \tilde{\rho}_2, \dots, \tilde{\rho}_N\},$$

avec  $\tilde{\rho}_0 = 1$ ,  $\tilde{\rho}_N = N! \rho_N$  et  $\tilde{\rho}_{N+1} = 0$ . Notons encore que, dans le cas où  $s > 1$ , les fonctions  $\tilde{\rho}_s$  sont souvent appelées *fonctions de corrélation*, puisqu'elles permettent effectivement d'exprimer les corrélations entre les  $s$  particules de l'essaim à un instant donné. Si l'on considère par exemple un sous-ensemble quelconque  $\omega \subset \mu$  de l'espace des phases à une particule, on a d'après les définitions précédentes :

$$(3.11) \int_{\omega} \tilde{\rho}_1(\vec{x}_1; t) d\vec{x}_1 = \bar{n}_{\omega}(t),$$

où  $\bar{n}_{\omega}(t)$  est la valeur moyenne à l'instant  $t$  du nombre de particules contenues dans  $\omega$  (ou nombre d'occupation  $n_{\omega}$ ), et

$$(3.12) \int_{\omega \times \omega} \tilde{\rho}_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2; t) d\vec{x}_1 d\vec{x}_2 = \overline{n_{\omega}(n_{\omega}-1)}(t);$$

il s'ensuit que l'autocorrélation de la variable  $n_{\omega}$  à l'instant  $t$ , définie comme le carré moyen des fluctuations  $(n_{\omega} - \bar{n}_{\omega})^2$ , s'exprime bien au moyen des fonctions de distribution réduites  $\tilde{\rho}_1$  et  $\tilde{\rho}_2$ .

b. Différentes formes de la hiérarchie. Le système des équations de la hiérarchie B.B.G.K.Y. décrit l'évolution des fonctions de distribution réduites  $\tilde{\rho}_s$  et se déduit de l'équation de Liouville en intégrant celle-ci sur les  $(N-s)$  variables  $\vec{x}_{s+1}, \dots, \vec{x}_N$ . Nous considérons dans ce qui suit un système clas-

sique isolé, constitué de  $N$  particules supposées ponctuelles dont l'interaction est décrite par des forces centrales, indépendantes de la vitesse des particules, et dérivant d'un potentiel additif  $V = \sum_{i < j=1}^N \sum \phi(r_{ij})$ , où  $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ ; l'hamiltonien d'un tel système s'écrit :

$$(3.13) H_N(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N) = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{i < j=1}^N \sum \phi(r_{ij}),$$

et l'équation de Liouville (2.6) qui gouverne l'évolution de la densité en phase à  $N$  particules  $\rho_N(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N, t)$ , prend la forme :

$$(3.14) \frac{\partial \rho_N}{\partial t} = [H_N, \rho_N] \equiv L_N \rho_N$$

où l'opérateur de Liouville  $L_N$  est défini par :

$$(3.15) L_N \equiv - \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i} + \sum_{i \neq j=1}^N \sum \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i}.$$

On obtient les équations de la hiérarchie en intégrant l'équation (3.14) sur les variables  $\vec{x}_{s+1}, \dots, \vec{x}_N$ ; en admettant que les fonctions de distribution (ainsi que leurs premières dérivées) s'annulent sur les parois du système et pour des impulsions infinies ( $\vec{p}_i = \pm \infty$ ), on montre\* que les fonctions de distribution  $\tilde{\rho}_s(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_s; t)$  satisfont au système d'équations

$$(3.16) \frac{\partial \tilde{\rho}_s}{\partial t} = L_s \tilde{\rho}_s + C_{s,s+1} \tilde{\rho}_{s+1},$$

où  $L_s$  est l'opérateur de Liouville relatif à un essaim de  $s$  particules, défini par (3.15) avec  $N = s$ , et où l'on a posé :

$$(3.17) C_{s,s+1} \tilde{\rho}_{s+1} = \int_{\Lambda \times R^3} d\vec{x}_{s+1} \frac{\partial \phi(r_{i,s+1})}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i} \tilde{\rho}_{s+1}.$$

\*Nous n'indiquons pas la démonstration qui figure dans tous les ouvrages classiques; voir par exemple [20, 31, 32, 33].

On voit d'après (3.16) que l'évolution de  $\tilde{\rho}_{s+1}$  résulte de la somme de deux termes : le premier,  $L_s \tilde{\rho}_s$ , décrit le mouvement des  $s$  particules en interaction entre elles, alors que le second,  $C_{s,s+1} \tilde{\rho}_{s+1}$ , représente la contribution due à l'interaction des  $s$  particules de l'essaim avec les  $N-s$  particules restantes (en vertu de la symétrie des fonctions de distribution) ; l'équation relative à  $\tilde{\rho}_s$  fait donc intervenir la fonction d'ordre supérieur  $\tilde{\rho}_{s+1}$ , de sorte que les équations du système (3.16) sont couplées de proche en proche, et forment une chaîne équivalente à l'équation de Liouville (3.14) : ce sont les équations de la hiérarchie B.B.G.K.Y.

On tire immédiatement de ces équations l'importante conséquence suivante : les fonctions de distribution réduites  $\tilde{\rho}_1$  et  $\tilde{\rho}_2$  ne permettent *pas* de définir une description réduite autonome de l'état du système. En effet, dans les cas particuliers  $s=1$  ou  $2$ , on voit d'après (3.16) que l'équation d'évolution de  $\tilde{\rho}_1$  dépend de  $\tilde{\rho}_2$ , que celle de  $\tilde{\rho}_2$  dépend à son tour de  $\tilde{\rho}_3$ , et ainsi de suite jusqu'à  $\tilde{\rho}_N$  ; il s'ensuit que l'évolution de  $\tilde{\rho}_1$  et  $\tilde{\rho}_2$  est en fait déterminée par l'évolution de la fonction de distribution à  $N$  particules  $\tilde{\rho}_N$ , qui obéit elle-même à l'équation de Liouville. Ainsi, bien que l'état statistique d'un système puisse généralement s'exprimer au moyen des seules fonctions réduites  $\tilde{\rho}_1$  et  $\tilde{\rho}_2$  (comme nous l'avons vu ci-dessus), la connaissance de ces fonctions à chaque instant  $t$  implique nécessairement l'intégration de l'équation de Liouville, c'est-à-dire le recours à la "description maximale". Pour obtenir une description réduite autonome, il faut donc pouvoir s'arrêter dans la hiérarchie (3.16) à un certain rang : ceci n'est possible que si l'on peut exprimer le terme d'interaction (3.17) au moyen des seules fonctions de distribution  $\tilde{\rho}_s$ , de rang inférieur à  $s+1$  : c'est le rôle des hypothèses de fermeture de la hiérarchie, qui portent sur la statistique des interactions entre particules et qui permettent d'introduire l'irréversibilité et la dissipativité dans l'évolution.

D'après les raisonnements du paragraphe précédent,

la justification rigoureuse de ces hypothèses repose nécessairement sur la mise en oeuvre de passages à la limite appropriés. Nous verrons dans la section 4 qu'il y a lieu de procéder, à cet effet, à un changement d'échelle convenable des fonctions de distribution réduites  $\tilde{\rho}_s$ . Pour traiter le passage à la limite thermodynamique, il est commode de faire apparaître dans la normalisation le volume  $V(\Lambda)$  occupé par le fluide, en introduisant les fonctions de distribution réduites spécifiques  $F_s(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_s; t)$  définies par :

$$(3.8') \quad F_s(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_s; t) = V^s \int_{(\Lambda \times \mathbb{R}^3)^{N-s}} \rho_N(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_N; t) d\vec{x}_{s+1} \dots d\vec{x}_N,$$

avec la condition de normalisation

$$(3.9') \quad \int_{(\Lambda \times \mathbb{R}^3)^s} F_s(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_s; t) d\vec{x}_1 \dots d\vec{x}_s = V^s.$$

Les équations de la hiérarchie (3.16) s'écrivent dans ce cas :

$$(3.18) \quad \frac{\partial F_s}{\partial t} = L_s F_s + \frac{N-s}{V} C_{s,s+1} F_{s+1};$$

à la limite thermodynamique  $N \rightarrow \infty$ ,  $V \rightarrow \infty$ ,  $\lim N/V = n = \text{cte}$ , elles se réduisent à :

$$(3.19) \quad \frac{\partial F_s}{\partial t} = L_s F_s + n C_{s,s+1} F_{s+1},$$

à condition naturellement d'admettre l'existence des fonctions  $F_s$  à cette limite.

Pour étudier les problèmes de fermeture, il est alors utile de faire apparaître dans (3.19) les paramètres caractéristiques du système. On remarque d'abord la présence de la concentration  $n$  devant le terme d'interaction du second membre de (3.19), ce qui suggère l'emploi de techniques de perturbation dans le cas de milieux modérément denses. En introduisant d'autre part l'ordre de grandeur  $\phi$ , et la portée "effective"  $r_0$  du potentiel d'interaction, ainsi que la vitesse moyenne (thermique)  $\bar{v} = (kT/m)^{1/2}$ , on peut mettre les équations (3.19) sous la forme "sans dimensions" (cf. [34]) :

$$(3.20) \frac{\partial F'_s}{\partial t} + K_s F'_s - \frac{\phi_0}{kT} I_s F'_s = (nr_0^3) \left( \frac{\phi_0}{kT} \right) C_{s,s+1} F'_{s+1},$$

dans lesquelles les  $F'_s$  sont des fonctions de distribution sans dimensions et où l'on a posé d'après (3.15) :

$$(3.21) L_s \equiv -K_s + I_s, \quad K_s \equiv \sum_{i=1}^s \frac{p_i}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{r}_i}, \quad I_s \equiv \sum_{i < j=1}^s \sum \frac{\partial \phi(r_{ij})}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{p}_i},$$

les opérateurs  $K_s$  et  $I_s$  correspondant respectivement à l'énergie cinétique et à l'énergie potentielle des  $s$  particules de l'essaim considéré.

L'intérêt des équations (3.20) est de montrer que la hiérarchie dépend essentiellement des deux paramètres sans dimensions  $\phi_0/kT$  et  $nr_0^3$  qui représentent respectivement le rapport de l'énergie potentielle d'interaction de deux particules à leur énergie cinétique moyenne et le nombre moyen de particules contenues dans la sphère d'interaction (de rayon  $r_0$ ). Selon les valeurs prises par ces paramètres, on est conduit à définir différents régimes caractéristiques de l'évolution du système qui comportent comme cas particuliers les situations limites évoquées au paragraphe précédent. On distingue ainsi :

- le cas des systèmes dilués ou modérément denses, avec un couplage fort à courte portée, où l'on a :

$$(3.22) \quad nr_0^3 = \epsilon \ll 1, \quad \phi_0/kT = 1;$$

à la limite  $nr_0^3 \rightarrow 0$ , on obtient le cas d'un fluide idéal dont le comportement cinétique peut être décrit à la limite de Boltzmann-Grad (avec  $nr_0^3 = \text{cte}$ ) par l'équation de Boltzmann.

- le cas des systèmes faiblement couplés, satisfaisant à

$$(3.23) \quad nr_0^3 = 1, \quad \phi_0/kT = \epsilon \ll 1;$$

la situation limite correspondante est naturellement celle du couplage faible, définie au paragraphe précédent, qui conduit à une équation du type Fokker-Planck.

- le cas du "régime de Debye", défini par les conditions

$$(3.24) \quad \phi_0/kT = \epsilon \ll 1, \quad nr_0^3 = 1/\epsilon,$$

qui sont vérifiées par des interactions faibles à longue portée (forces coulombiennes) lorsque les effets collectifs jouent un rôle dominant ; cette situation concerne essentiellement les milieux ionisés (plasmas) pour lesquels la portée effective ( $r_0$ ) de l'interaction est égale à la longueur de Debye  $r_D$  (qui traduit l'effet d'écran des particules de signe opposé) ; l'état d'un tel système est alors caractérisé par le paramètre de plasma  $g = \phi_0/kT = 1/nr_D^3$ . Le cas limite correspondant n'est autre que la limite du champ moyen, pour laquelle  $\epsilon (=g) \rightarrow 0$  ; dans ce cas, les équations (3.20) se réduisent formellement à la hiérarchie de Vlasov

$$(3.25) \quad \frac{\partial F_s}{\partial t} + K_s F_s = C_{s,s+1} F_{s+1},$$

d'où peut être déduite l'équation de Vlasov (cf. chapitre 4).

L'étude des solutions de la hiérarchie pour ces différents régimes est l'un des problèmes majeurs de la MSHE. Ainsi que nous l'avons indiqué au paragraphe (3.1d), des solutions rigoureuses peuvent être établies dans les cas limites considérés ci-dessus ; elles permettent de retrouver les équations de Boltzmann, de Fokker-Planck et de Vlasov, et font l'objet des théorèmes limites que nous étudierons dans le chapitre 4. En dehors de ces situations limites particulières, la résolution du système (3.20) n'a pu être abordée dans le cas général qu'au moyen de méthodes de perturbation suivant l'un des petits paramètres définis ci-dessus. On considère ainsi des développements en puissances de la densité (pour les gaz neutres modérément denses), ou suivant le paramètre  $g$  (pour les plasmas), qui conduisent à écrire, compte-tenu de l'existence de différentes échelles de temps dans l'évolution du système, des relations de fermeture valables pour les premiers ordres d'approximation. Ces méthodes se présentent en fait comme une application aux systèmes hors d'équilibre des techniques de développements en fonctions d'essaim (ou "clusters") mises

en oeuvre avec succès en MSE ; toutefois, l'utilisation de tels développements en MSHE rencontre de sérieuses difficultés liées à l'apparition de divergences dans les termes d'ordre supérieur à 2, de sorte que le domaine de validité des résultats obtenus demeure assez restreint.

c. La description cinétique au sens de Bogolioubov. Comme nous nous intéressons surtout à la démonstration de résultats rigoureux, un exposé de ces méthodes perturbatives sortirait du cadre de cet article\*. Cependant, pour illustrer les considérations générales des paragraphes (3.1c et d), il nous paraît utile de rappeler brièvement les grandes lignes de la méthode proposée par Bogolioubov [31-33], où les idées physiques sous-jacentes sont bien mises en évidence.

Nous considérons pour simplifier le cas des gaz neutres modérément denses, avec des forces répulsives à courte portée  $r_0$ , pour lesquels les conditions (3.22) sont vérifiées. Comme la condition  $nr_0^3 = \epsilon$  s'écrit aussi  $r_0/\lambda = \epsilon$ , (avec  $\lambda = 1/nr_0^3$ ), on voit qu'un tel système comporte deux échelles de longueur très différentes  $r_0$  et  $\lambda$ , auxquelles il faut encore ajouter une échelle macroscopique  $L \gg \lambda$ , caractéristique du niveau hydrodynamique. A ces trois longueurs correspondent les trois temps caractéristiques  $t_c = r_0/\bar{v}$  (durée d'une "collision"),  $t_0 = \lambda/\bar{v}$  (temps moyen entre deux collisions) et  $T = L/\bar{v}$  (temps macroscopique), qui satisfont à la relation  $t_c \ll t_0 \ll T$ ; dans ces conditions, le mouvement des particules dans le système est libre la plupart du temps, à l'exception de brèves "collisions" dont la fréquence dépend naturellement de la densité  $n$ . Ceci étant, l'idée fondamentale de Bogolioubov consiste à supposer que ces trois échelles de temps caractérisent également trois étapes fondamentales (ou trois "niveaux de description") de l'évolution du système, qui sont réalisées pour une large classe de conditions initiales ; ce sont successivement :

-  $\alpha$ ) L'étape initiale,  $0 < t \leq t_c$ , durant laquelle

\*Ces méthodes ont d'ailleurs fait l'objet de nombreux exposés dans la littérature ; voir notamment [35-37].

les fonctions de corrélation  $F_s$  ( $s \geq 2$ ) subissent des changements très rapides qui dépendent étroitement des conditions initiales alors que la fonction de distribution à une particule,  $F_1(\vec{x}_1; t)$ , varie très lentement à cette échelle.

-  $\beta$ ) L'étape cinétique,  $t_c < t < t_0$ , où la variation temporelle des  $F_s$  est entièrement déterminée par celle de  $F_1(\vec{x}_1; t)$ , quelles que soient les conditions initiales ; après un temps  $t$  de l'ordre de  $t_c$  (temps de synchronisation), les fonctions de corrélation deviennent des fonctionnelles de  $F_1$ ,  $F_s(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_s; t) \rightarrow F_s(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_s | F_1(\cdot; t))$ , et l'évolution du système ne dépend plus à cette échelle que de la fonction de distribution  $F_1(\vec{x}_1; t)$  qui satisfait, pour des conditions initiales convenables, à une équation cinétique de la forme :

$$(3.26) \quad \frac{\partial F_1}{\partial t} = A(\vec{x}_1 | F_1).$$

-  $\gamma$ ) L'étape hydrodynamique,  $t_0 < t < T$ , où la dépendance temporelle de  $F_1$  est à son tour entièrement déterminée par celle de ses cinq premiers moments, c'est-à-dire des cinq quantités macroscopiques  $n(\vec{r}_1; t) = (N/V) \int F_1(\vec{x}_1; t) d\vec{p}_1$  (densité locale),  $n(\vec{r}_1; t) \vec{u}(\vec{r}_1; t) = (N/V) \int \vec{p}_1 F_1(\vec{x}_1; t) d\vec{p}_1$  (vitesse locale) et  $\frac{3}{2} k n(\vec{r}_1; t) T(\vec{r}_1; t) = (N/V) \int \frac{p_1^2}{2m} F_1(\vec{x}_1; t) d\vec{p}_1$  (température locale) qui définissent l'état hydrodynamique du fluide ; du point de vue physique, ceci revient à admettre qu'après un temps  $t$  de l'ordre de  $t_0$ , il y a eu suffisamment de collisions dans le fluide pour que s'établisse un certain état d'équilibre local, caractérisé par les cinq variables macroscopiques  $n$ ,  $\vec{u}$  et  $T$ , et pour que la fonction de distribution  $F_1(\vec{x}_1; t)$  devienne une fonctionnelle de ces variables :  $F_1(\vec{x}_1; t) \rightarrow F_1(\vec{x}_1 | n, \vec{u}, T)$  ; cette hypothèse est d'ailleurs identique à celle qui est à la base de la méthode de Hilbert-Enskog pour résoudre l'équation de Boltzmann.

On remarquera l'analogie entre les hypothèses  $\beta$  et  $\gamma$  qui définissent les passages aux "niveaux" cinétique et hydrodynamique comme deux "processus de réduction" successifs de la description du système, conformément aux considérations des

paragraphes (3.1b $\beta$  et c) ; on retrouve ainsi le premier ingrédient nécessaire à toute description macroscopique d'un système hors d'équilibre. En particulier, l'hypothèse  $\beta$  relative à la dépendance fonctionnelle des  $F_s$  par rapport à  $F_1$  revient à introduire un certain "coarse-graining" spatial et temporel, d'échelles ( $r_c$  et  $t_c$ ), en vue d'obtenir une description cinétique autonome de l'état du système au moyen d'une équation du type (3.26) ; les fonctions de distribution  $F_s(|F_1)$ , si elles existent (!), correspondent alors à une *classe de solutions particulières* de la hiérarchie, celles où les  $F_s( ; t)$  se réduisent aux fonctionnelles  $F_s(|F_1(t))$ . De même, l'hypothèse  $\gamma$  conduit à rechercher la classe particulière des *solutions "normales"* de l'équation cinétique de Boltzmann, pour lesquelles l'évolution temporelle de  $F_1$  est déterminée uniquement en fonction des grandeurs macroscopiques  $n, \vec{u}, T$  et de leurs dérivées, qui satisfont aux équations de l'hydrodynamique.

La validité des hypothèses précédentes dépend naturellement de l'existence de ces classes de solutions particulières pour la hiérarchie et l'équation cinétique respectivement. Si l'existence de telles solutions pouvait être établie, il est clair que les "processus de réduction" définis ci-dessus ne constitueraient plus des hypothèses plus ou moins plausibles mais résulteraient des propriétés mêmes des équations de la hiérarchie. Etant donné la complexité de ces équations, ces problèmes n'ont pu être abordés qu'au moyen de techniques de perturbation suivant l'un des paramètres de la hiérarchie, ou suivant le "paramètre d'uniformité"  $\xi$  qui apparaît dans l'équation cinétique. L'exposé de ces méthodes étant ici hors de propos, nous nous bornerons à en résumer les résultats les plus significatifs :

- Pour étudier le passage au niveau hydrodynamique, on part d'une équation cinétique, celle de Boltzmann essentiellement, dont on cherche les solutions "normales" sous la forme de développements de  $F_1(\vec{x}_1 | n, \vec{u}, T)$  en puissances du paramètre  $\xi = \lambda/L$  en posant  $F_1 = F_1^{(0)}(\vec{x}_1 | n, \vec{u}, T) + \xi F_1^{(1)}(\vec{x}_1 | n, \vec{u}, T) + \xi^2 F_1^{(2)}(\vec{x}_1 | n, \vec{u}, T) + \dots$ . Cette méthode, développée systématiquement

par Chapman et Cowling [38], permet : (i) de calculer effectivement les approximations successives de la fonction de distribution,  $F_1^{(0)}, F_1^{(1)}, F_1^{(2)}$ , etc. ; (ii) d'obtenir à chaque ordre d'approximation les équations hydrodynamiques correspondantes pour les variables  $n, \vec{u}$  et  $T$  : équations d'Euler à l'ordre zéro (pour le cas limite  $\xi \rightarrow 0$ ), équation de Navier-Stokes à l'ordre un, de Burnett à l'ordre deux, ... ; enfin (iii) de calculer les approximations successives des coefficients de transport qui interviennent dans les équations hydrodynamiques à partir de l'ordre un. Quant au domaine de validité de ces résultats, il apparaît assez bien établi, grâce notamment à des travaux de Grad [39] où il est montré que les solutions de l'équation de Boltzmann relatives à un certain problème initial tendent asymptotiquement (avec  $\xi$  comme petit paramètre) vers les solutions "normales" d'Enskog-Chapman. On peut donc en conclure que la méthode de Hilbert-Enskog-Chapman conduit à une description satisfaisante du "niveau" hydrodynamique et qu'elle permet notamment de calculer les coefficients de transport du fluide en évitant les difficultés de la théorie de Green-Kubo (cf. § 2.6) ; mais son application reste subordonnée à la déduction préalable d'équations cinétiques définissant un régime intermédiaire entre les descriptions maximale et hydrodynamique.

- Pour obtenir effectivement les équations correspondant à l'étape cinétique, on cherche des solutions particulières de la hiérarchie sous la forme des fonctionnelles  $F_s(\dots | F_1)$ , en développant celles-ci en puissances de la densité :

$$(3.27) \quad F_s(\dots | F_1) = F_s^{(0)}(\dots | F_1) + n F_s^{(1)}(\dots | F_1) + \dots \\ + n^2 F_s^{(2)}(\dots | F_1) + \dots$$

Avec ces développements, la hiérarchie devient un système d'équations fonctionnelles relatives aux  $F_s^{(l)}$  qui sont maintenant découplées ; elles permettent donc de calculer de proche en proche la dépendance fonctionnelle en  $F_1$  des  $F_s^{(1)}(\dots | F_1)$ , à condition de se donner des conditions aux limites (ou asymptotiques)

tiques) convenables qui jouent le rôle de conditions initiales. Dans le cas des gaz neutres, avec des forces intermoléculaires répulsives et de courte portée, on admet (avec Bogolioubov) comme condition aux limites pour des systèmes spatialement homogènes :

$$(3.28) \lim_{t \rightarrow \infty} \{ U_{-t}^{(s)} F_S(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_S | F_1(\cdot; t)) - U_{-t}^{(s)} \prod_{i=1}^S F_1(\vec{x}_i; t) \} = 0,$$

où  $U_t^{(s)}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_s) = \exp[-t L_s(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_s)]$  est l'opérateur d'évolution (2.4) relatif à un essaim de  $s$  particules en interaction. Cette condition signifie que les fonctionnelles  $F_S(\dots | F_1)$  se factorisent en un produit de  $F_1$  lorsque les distances interparticulaires deviennent suffisamment grandes (par rapport à  $r_0$ ) : c'est une forme atténuée de l'hypothèse du chaos moléculaire, en ce sens que l'absence de corrélations n'est postulée que pour les instants où les particules sont infiniment éloignées ; elle n'est donc pas incompatible avec les équations du mouvement, mais elle introduit un élément d'irréversibilité dans le formalisme, puisqu'elle revient à supposer que le passé est caractérisé par un état sans corrélations (cf. [32-33]). Ainsi, la condition (3.28) correspond dans cette théorie au deuxième ingrédient nécessaire à la MSHE que nous avons mentionné en (3.1-c) : c'est une hypothèse de nature statistique qui porte sur l'état initial du système et qui a pour conséquence de sélectionner, dans l'ensemble des solutions  $F_S(\dots | F_1)$  de la hiérarchie, celles qui peuvent conduire à un comportement irréversible du système.

La connaissance des approximations successives  $F_S^{(1)}(\dots | F_1)$  permet alors d'obtenir l'équation cinétique (3.26) sous la forme d'un développement en puissances de la densité (analogue au développement du viriel dans le cas de l'équilibre). Cette équation se déduit de l'équation de la hiérarchie relative à  $F_1(\vec{x}_1; t)$  :

$$(3.29) \frac{\partial F_1}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial F_1}{\partial \vec{r}_1} = n C_{1,2} F_2 = n \int_{\Lambda \times R^3} d\vec{x}_2 \frac{\partial \phi(r_{12})}{\partial \vec{r}_1} \cdot \frac{\partial F_2(\vec{x}_1, \vec{x}_2; t)}{\partial \vec{p}_1}$$

en y remplaçant  $F_2(\cdot; t)$  par  $F_2(\dots | F_1)$  et en utilisant le développement (3.27) ; l'équation cinétique (3.26) s'écrit ainsi :

$$(3.30) \frac{\partial F_1}{\partial t} = - \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial F_1}{\partial \vec{r}_1} + n \int_{\Lambda \times R^3} d\vec{x}_2 \frac{\partial \phi(r_{12})}{\partial \vec{r}_1} \cdot \left\{ \frac{\partial F_2^{(0)}(\dots | F_1)}{\partial \vec{p}_1} \right. \\ \left. + n \frac{\partial F_2^{(1)}(\dots | F_1)}{\partial \vec{p}_1} + \dots \right\} \equiv A(\vec{x}_1 | F_1) = A^{(0)}(\vec{x}_1 | F_1) + n A^{(1)}(\vec{x}_1 | F_1) \\ + n^2 A^{(2)}(\vec{x}_1 | F_1) + \dots,$$

où le terme  $A^{(0)} = - \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial F_1}{\partial \vec{r}_1}$  correspond au mouvement libre des particules ; quant aux termes  $A^{(1)}$  ( $l \geq 1$ ), ils résultent des interactions, ou "collisions", à 2, 3...  $l$  particules, et s'expriment sous la forme d'intégrales de collisions qui mettent en jeu successivement la dynamique du problème à deux corps ( $A^{(1)}$ ), celle du problème à trois corps ( $A^{(2)}$ ), etc. L'équation (3.30) constitue donc une *généralisation de l'équation de Boltzmann* au cas des fortes densités. Le terme du premier degré en  $n$  correspond à l'approximation des gaz dilués dans laquelle n'interviennent que les collisions binaires ; on obtient alors une équation du type Boltzmann généralisée qui, dans le cas spatialement homogène, se réduit rigoureusement à l'équation de Boltzmann elle-même. Le terme du second degré en  $n$  est la contribution à l'équation cinétique due aux collisions ternaires ; si l'on néglige les contributions d'ordre  $n^l$  ( $l \geq 3$ ), ce terme représente une correction à l'équation des gaz dilués qui a pu être effectivement calculée [31, 32, 35, 40, 41]. Mais, pour tous les termes d'ordre supérieur à  $n^2$ , il apparaît dans les  $A^{(l)}$  ( $l \geq 3$ ) des divergences pour  $t \rightarrow \infty$  qui sont dues aux "recollisions" successives entre deux particules, provoquées par les autres particules de l'essaim.

L'existence de ces divergences est une des difficultés majeures de la théorie des gaz modérément denses, fondée sur des développements en puissances de la densité. Leur origine a pu être étudiée systématiquement en appliquant aux fonctions de distribution hors d'équilibre  $F_S(\dots; t)$ , des méthodes de développement en fonctions d'essaim ("clusters") analogues à celles utilisées dans le cas de l'équilibre [35, 36, 37]. Pour un système situé dans l'espace physique ordinaire (où  $d = 3$ ), on trouve ainsi que le terme  $A^{(3)}$  diverge pour

$t \rightarrow \infty$  comme  $\log(t/t_c)$  et que les termes  $A^{(1)}$ , avec  $1 \geq 4$ , divergent comme  $(t/t_c)^{d-3}$ ; pour un système à deux dimensions (où  $d = 2$ ), on trouverait que la divergence en  $\log(t/t_c)$  a lieu pour le terme  $A^{(2)}$ , alors que les termes  $A^{(1)}$ , avec  $1 \geq 3$ , divergent comme  $(t/t_c)^{d-2}$ . Une analyse détaillée des intégrales de collisions montre que ces divergences proviennent de ce que les particules de l'essaim considéré peuvent se déplacer librement sur des distances arbitrairement longues entre deux "recollisions"; or, dans un système à  $N$  particules, cette distance ne peut en réalité excéder quelques l.p.m., en raison de la présence de toutes les particules du système extérieures à l'essaim considéré. Il s'ensuit que les développements en puissances de la densité ne sont pas bien adaptés à l'étude des systèmes hors d'équilibre, puisque chacun de leurs termes ne dépend que de la dynamique d'un petit groupe de 1 particules, considérées séparément du reste du système.

On conclut de ce qui précède : (i) que le développement (3.30) de l'équation cinétique en puissances de la densité n'est valable que jusqu'au terme  $l = 2$  (dans le cas physique où  $d = 3$ ) et n'est donc pas valable pour des gaz denses ; (ii) qu'il en est de même pour l'hypothèse de la dépendance fonctionnelle des  $F_s$  par rapport à  $F_1$  qui sert à définir l'é-

tape (ou le "niveau") cinétique. Cette situation peut cependant être améliorée en utilisant des techniques de "resommation" des termes divergents qui reviennent à tenir compte de l'effet du l.p.m. dans les intégrales de collisions [42,43]; on montre alors que ces termes "resommés" donnent une contribution en  $n^2 \log n$  dans les coefficients de transport, de sorte que ceux-ci ne peuvent pas s'exprimer seulement par des développements en puissances de  $n$ . On voit ainsi que la description cinétique d'un fluide pose des problèmes délicats dès que l'on s'écarte notablement du cas du fluide dilué; ceci est d'ailleurs à rapprocher des difficultés mentionnées en (3.1-d) concernant la définition d'un passage à la limite convenable pour un gaz modérément dense. Pour les gaz dilués, les méthodes perturbatives conduisent seulement à une certaine généralisation de l'équation de Boltzmann dont la validité est subordonnée à celle de l'ensemble de la théorie; d'où l'intérêt

qui s'attache à la démonstration de résultats rigoureux dans le cas de la limite de Boltzmann-Grad.

d. Cas du modèle des sphères dures. Pour étudier le passage à la limite de Boltzmann-Grad (ou  $r_0 \rightarrow 0$ ), il est commode de se placer dans le cas où l'interaction entre particules est représentée par un modèle de sphères dures de diamètre  $\sigma$ . L'utilisation de ce modèle rencontre cependant des difficultés d'ordre technique dues au caractère discontinu de l'évolution résultant des collisions instantanées entre les particules. Le formalisme de l'équation de Liouville et de la hiérarchie, qui suppose une évolution et des forces d'interaction continues, doit donc être adapté à cette situation particulière. On y parvient en modifiant la définition de l'espace des phases de manière à retrouver dans le nouvel espace une évolution continue; il résulte d'une analyse non triviale (Cercignani [44] et Lanford [2]) que ceci est possible à condition de négliger l'ensemble des points de phase correspondant à des collisions "rasantes" et aux collisions triples ou d'ordre supérieur. L'évolution du système est alors décrite par une équation de Liouville, d'où l'on peut déduire les équations de la hiérarchie B.B.G.K.Y. pour le modèle des sphères dures; celles-ci s'écrivent sous une forme analogue à (3.16) :

$$(3.31) \quad \frac{\partial \tilde{\rho}^s}{\partial t} = L_s \tilde{\rho}^s + C_{s,s+1} \tilde{\rho}^{s+1}, \quad 1 \leq s \leq N,$$

dans lesquelles  $L_s$  est l'opérateur de Liouville à  $s$  particules (comprenant les collisions élastiques binaires entre celles-ci) et où l'opérateur de collisions  $C_{s,s+1}$  est maintenant défini par :

$$(3.32) \quad C_{s,s+1} \tilde{\rho}^{s+1} = \sigma^2 \int_{S^2 \times \mathbb{R}^3} d\vec{p}_{s+1} d\hat{\omega} \cdot \hat{\omega} \cdot \left( \frac{\vec{p}_{s+1} - \vec{p}_i}{m} \right) \tilde{\rho}_{s+1}(\vec{x}_1, \dots, \vec{x}_s, \vec{r}_i + \sigma \hat{\omega}, \vec{p}_{s+1});$$

dans (3.32),  $\hat{\omega}$  représente le vecteur-unité porté par la ligne des centres des deux particules ( $i$ ) et ( $s+1$ ) à l'instant de leur collision et pointant du centre de ( $i$ ) vers ( $s+1$ ) et  $d\hat{\omega}$  est l'élément d'aire de la sphère unité  $S^2$ . Avec ces définitions, les deux inégalités  $\hat{\omega} \cdot (\vec{p}_i - \vec{p}_{s+1}) \geq 0$  et  $\hat{\omega} \cdot (\vec{p}_i - \vec{p}_{s+1}) \leq 0$  correspondent respectivement au cas où les deux particules ( $i$ )

et (s+1) se rapprochent avant une collision et celui où elles se séparent après une collision.

Il est utile d'écrire l'équation relative à  $\tilde{\rho}(\vec{x}_1; t)$  qui peut être mise sous une forme très voisine de l'équation de Boltzmann. A cet effet, on décompose l'intégrale sur  $\hat{\omega}$  figurant dans  $C_{1,2}$  en deux intégrales prises sur les deux demi-sphères ( $S^-$ ) et ( $S^+$ ) définies respectivement par :  $\hat{\omega} \cdot (\vec{p}_2 - \vec{p}_1) \geq 0$  et  $\hat{\omega} \cdot (\vec{p}_2 - \vec{p}_1) \leq 0$  ; grâce à la nouvelle définition de l'espace des phases, on peut alors remplacer dans la première intégrale le point de phase  $(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_1 + \sigma \hat{\omega}, \vec{p}_2)$  correspondant au cas où les deux particules se séparent après une collision, par le point de phase  $(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_1 + \sigma \hat{\omega}, \vec{p}_2')$  correspondant au cas où les deux particules entrent en collision avec des impulsions  $(\vec{p}_1', \vec{p}_2') = T_{\hat{\omega}}(\vec{p}_1, \vec{p}_2)$ , qui redonnent  $\vec{p}_1$  et  $\vec{p}_2$  après la collision (voir § 3.3). En changeant  $\hat{\omega}$  en  $-\hat{\omega}$  dans cette intégrale et en remarquant que  $L_1 = -(\vec{p}_1/m) \cdot \partial / \partial \vec{r}_1$ , la première équation de la hiérarchie (3.31) s'écrit finalement :

$$(3.33) \quad \frac{\partial \tilde{\rho}_1(\vec{x}_1; t)}{\partial t} + \frac{\vec{p}_1}{m} \cdot \frac{\partial \tilde{\rho}_1(\vec{x}_1; t)}{\partial \vec{r}_1} = \sigma^2 \int_{S^+ \times R^3} d\hat{\omega} d\vec{p}_2 \hat{\omega} \cdot \left[ \frac{\vec{p}_1 - \vec{p}_2}{m} \right]$$

$$\{ \tilde{\rho}_2(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_1 - \sigma \hat{\omega}, \vec{p}_2'; t) - \tilde{\rho}_2(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_1 + \sigma \hat{\omega}, \vec{p}_2; t) \} ,$$

d'où l'on peut déduire formellement l'équation de Boltzmann moyennant des hypothèses que nous allons discuter dans le paragraphe suivant.

### BIBLIOGRAPHIE

1. J.L. Lebowitz, (a) Hamiltonian Flows and Rigorous Results in Nonequilibrium Statistical Mechanics, in Statistical Mechanics, New Concepts, New Problems, New Applications (S.A. Rice, K.F. Freed and J.C. Light, eds.), Univ. of Chicago Press, 1972.  
(b) Exact Results in Nonequilibrium Statistical Mechanics : Where do we stand ; Prog. Theor. Phys. Suppl., 64 (1978), 35.
2. O.E. Lanford, Time Evolution of Large Classical Systems, in Dynamical Systems, Theory and Applications, (J. Moser, ed.), Springer-Verlag, Berlin, (1975).
3. O. Penrose, Foundations of Statistical Mechanics ; Rep. Prog. Phys., 42, (1979), 1937.
4. H. Spohn, Kinetic Equations from Hamiltonian Dynamics : Markovian Limits ; Rev. Mod. Phys., 52, (1980), 569.
5. B.O. Koopman, Proc. Nat. Acad. Sci. U.S.A., 17 (1931), 315.
6. R.C. Tolman, The Principles of Statistical Mechanics, Oxford Univ. Press, 1938.
7. E.T. Jaynes, (a) Phys. Rev., 106, (1957), 620.  
(b) Phys. Rev., 108, (1957), 171.  
(c) Information Theory and Statistical Mechanics, in 1962 Brandeis Lectures, Vol 3, Benjamin, New-York, 1963.
8. P.R. Halmos, Lectures on Ergodic Theory, Chelsea Publ. Co., New-York, 1956.
9. V.I. Arnold et A. Avez, Problèmes ergodiques de la Mécanique classique, Gauthier-Villars, Paris, 1967.
10. Ya. G. Sinai, Introduction to Ergodic Theory, Math. Notes, Princeton Univ. Press, 1976.
11. P. and T. Ehrenfest, Begriffliche Grundlagen der Statistische Auffassung in der Mechanik, in Enzykl. Mat. Wiss. IV 2, II. (Leipzig : Teubner, 1911) ; Engl. Tranl. : The Conceptual Foundations of the Statistical Approach in Mechanics, Cornell Univ. Press, 1959.

12. Ya G. Sinai, (a) in *Statistical Mechanics : Foundations and Applications* (Proc. IUPAP Meeting, 1966), T.A. Bak ed. (New-York : Benjamin, 1967), p. 559.  
(b) Development of Krylov's Ideas, in *Works on the Foundations of Statistical Physics by N.G. Krylov*, (Engl. Transl.) Princeton Univ. Press, 1979.
13. A.I. Khintchine, *Mathematical Foundations of Statistical Mechanics*, Dover, New-York, 1949.
14. D. Ruelle, *Statistical Mechanics, Rigorous Results*, Benjamin, New-York, 1969.
15. R.B. Griffiths, *Rigorous Results and Theorems, in Phase Transitions and Critical Phenomena*, C. Domb and M.S. Green eds., Vol 1, New-York Acad. Press, 1972, p.7.
16. R. Rechtman and O. Penrose, *J. Stat. Phys.* 19, (1978), 359.
17. R. Kubo, (a) *J. Phys. Soc. Japan*, 12, (1957), 570.  
(b) The Fluctuation-Dissipation Theorem, *Rep. Prog. Phys.* 29, (1966), 255.
18. J.R. Dorfman, *Kinetic and Hydrodynamic Theory of Time Correlation Functions*, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics III*, E.G.D. Cohen Ed., North-Holland, 1975.
19. I.E. Farquhar, *Ergodicity and Related Topics in Irreversibility in the Many-Body Problem*, J. Biel and J. Rae eds., Plenum Press, New-York 1972.
20. R. Balescu, *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Mechanics*, J. Wiley, New-York, 1975.
21. H. Grad, *Levels of Description in Statistical Mechanics and Thermodynamics*, In *Studies in the Foundations*, Vol 1, p. 49.
22. R. Zwanzig, *Phys. Rev.*, 124 (1961), 983.
23. H. Mori, *Prog. Theor. Phys.*, 33, (1965), 423.
24. L.S. Garcia-Colin and J.L. Del Rio, (a) *J. Stat. Phys.*, 16 (1977), 235.  
(b) *Physica* 96A, (1979), 606.
25. J.L. Del Rio and L.S. Garcia-Colin, *J. Stat. Phys.*, 19 (1978), 109.

26. O.E. Lanford, *Soc. Math. de France, Astérisque* 40 (1976), 117.
27. H. Mori, *Prog. Theor. Phys.* 52, (1974), 433.
28. H. Grad, *Principles of the Kinetic Theory of Gases*, in *Handbuch der Physik*, S. Flügge ed., (Springer-Verlag, Berlin), Vol. 12, (1958), 205.
29. M. Tokuyama and H. Mori, *Prog. Theor. Phys.* 56, (1976), 1073.
30. T. Morita, H. Mori and M. Tokuyama, *J. Stat. Phys.* 18, (1978), 137.
31. N.N. Bogolioubov, *Problems of Dynamical Theory in Statistical Physics*, (Engl. Trans.), in *Studies in Statistical Mechanics*, J. de Boer and G.E. Uhlenbeck eds., (North-Holland, Amsterdam, 1962), p.1.
32. E.G.D. Cohen, *The Boltzmann Equation and Its Generalization to Higher Densities*, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics*, E.G.D. Cohen ed., North-Holland, Amsterdam, 1962.
33. R. Jancel, *Les Fondements de la Mécanique Statistique Classique et Quantique*, Gauthier-Villars, Paris, 1963.
34. G. Sandri, *Ann. Phys.* 24 (1963), 332.
35. E.G.D. Cohen, (a) *On the Statistical Mechanics of Moderately Dense Gases not in Equilibrium*, in *Lectures in Theoretical Physics*, Vol VIII A (W.E. Brittin ed.), Univ. Colorado Press, 1966, p. 145).  
(b) *Kinetic Theory of Dense Gases*, in *Lectures in Theoretical Physics*, Vol. IX C (W.E. Brittin ed.), Univ. Colorado Press, 1967, p. 279.  
(c) *The Kinetic Theory of Dense Gases*, in *Fundamental Problems in Statistical Mechanics*, Vol. II, (E.G.D. Cohen ed.), North-Holland, Amsterdam, 1968.
36. T.Y. Wu, *Kinetic Equations of Gases and Plasmas*, Addison-Wesley, Reading, 1966.
37. J.R. Dorfman and H. van Beijeren, *The Kinetic Theory of Gases*, in *Statistical Mechanics*, Part B, (B.J. Berne, ed.), Plenum Press, New-York, 1977.

38. S. Chapman and T.G. Cowling, *The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases*, Cambridge Univ. Press, 1953.
39. H. Grad, (a) *Phys. Fluids*, 6 (1963), 147.  
(b) in : *Rarefied Gas Dynamics* (K. Karamcheti, ed.) Acad. Press, New-York, 1974.
40. M.S. Green and R.A. Piccirelli, *Phys. Rev.* 132, (1963), 1388.
41. S.T. Choh and G.E. Uhlenbeck, *The Kinetic Theory of Phenomena in Dense Gases*, Thesis, Univ. of Michigan, 1958.
42. K. Kawasaki and I. Oppenheim, *Phys. Rev.*, 139 (1965), 1763 A.
43. E.A. Frieman and R. Goldman, *J. Math. Phys.*, 7, (1966), 2153 ; 8, (1967), 1410.
44. C. Cercignani, (a) *Transp. Theory and Stat. Phys.* 2, (1972), 211 ;  
(b) *Theory and Application of the Boltzmann Equation*, Scottish Acad. Press, Edinburgh and London, 1975.