

EDITORIAL

Open Access



Kinetic theory without pain: an unpublished paper by Jean Ginibre

Jean Ginibre¹ and Yves Pomeau^{1*}

*Correspondence:

yves.pomeau@gmail.com

¹Ladhyx, Ecole Polytechnique,
Boulevard des Maréchaux, 91120,
Palaiseau, France

1 Introduction by Y. Pomeau

Let us first precise that the references quoted in this section are the ones postponed at the end the paper.

The Notes by Jean Ginibre on kinetic theory (“La théorie cinétique sans peine”) were written by him when he was still a student, slightly before he got his PhD. I thought it worthwhile to add a few comments to help understand this remarkable piece and to put it in the more general framework of theoretical physics at the time of their writing, this being based partly on personal memory and would likely be quite different when seen by others. Moreover, it is not intended to be a thorough review of progresses in the field made since, like in a standard review paper.

The situation of theoretical physics at the time, fifties to early sixties, was still dominated by the outstanding success of calculations of various effects due to the quantum interaction between electrons and electromagnetic radiation. This had given access [1] to phenomena like the Lambshift and to the small $(g - 2)$ difference. All this relied on elaborate strategies of calculation allowing to get rid of a priori diverging “corrections” with strategies invented by Heisenberg and Dirac in the thirties. Even though the results were certainly correct, the whole strategy of the calculation was not free of difficulties. Therefore there was a natural tendency for the most mathematically inclined theoreticians, as certainly Jean was, to try to put things on a safer ground. This is surely one of the basis of his use of a mathematical formalism aiming at putting things in a fully rigorous framework, somewhat unfamiliar to many physicists. Such a formalism allows to do equilibrium thermodynamics in an infinitely extended homogeneous system without dealing first with a finite system and then making its size grow to infinity at constant density and temperature. This tendency was strengthened by the successful approach of equilibrium problems like the understanding of phase transitions in various models of spin systems. However, as well understood by Jean, the understanding of nonequilibrium process was (and remains) far less advanced than the one of physics “at equilibrium”. This is partly because outside of equilibrium there is nothing like a Gibbs ensemble. The only available “mathematical object” describing nonequilibrium systems is the so-called BBGKY hierarchy, a quite cumbersome theory relating between themselves an infinite set of functions with an increasing number of arguments as one climbs the hierarchy. Because of its complexity and as emphasized by Jean, one has to make approximations to get something out of

© The Author(s) 2023. **Open Access** This article is licensed under a Creative Commons Attribution 4.0 International License, which permits use, sharing, adaptation, distribution and reproduction in any medium or format, as long as you give appropriate credit to the original author(s) and the source, provide a link to the Creative Commons licence, and indicate if changes were made. The images or other third party material in this article are included in the article's Creative Commons licence, unless indicated otherwise in a credit line to the material. If material is not included in the article's Creative Commons licence and your intended use is not permitted by statutory regulation or exceeds the permitted use, you will need to obtain permission directly from the copyright holder. To view a copy of this licence, visit <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.

this BBGKY hierarchy. The most remarkable result in the theory of nonequilibrium systems is the Boltzmann kinetic equation that requires that the system is at very low density so that the collisions (namely the strong interaction between particles) occur between a pair of particles only, or almost so if they interact by a smooth potential. Jean explains in the Notes how Boltzmann kinetic equation can be derived from the hierarchy, something done first by Bogoliubov [2] as he indicates. He does not mention one resounding success that took place slightly before the writing of the Notes, namely the derivation by Balescu and Lenard [3] of the kinetic equation for a neutral plasma. This case is not covered by the standard Boltzmann kinetic theory because the long range interaction between electric charges makes diverge the cross section of two body collisions and so the kinetic operator. The Balescu–Lenard kinetic operator introduces a kind of out-of-equilibrium screening of the interaction between electric charges like the one found at equilibrium in the Debye–Huckel theory of electrolytes.

The derivation by Bogoliubov [2] of Boltzmann kinetic equation used a fully coherent analysis of the dynamics of a dilute gas in a state close to uniform in space. This is no trivial matter because the original derivation by Boltzmann is based on many assumptions not showing very clearly what are the assumptions needed to make this kinetic equation valid and in particular what could be the “next order” corrections taking into account, for instance, finite density effects and/or of long range 2-body interactions. This “formal” derivation by Bogoliubov is done by Jean here and leads to a very compact form of Boltzmann kinetic equation, as written in his equation (3.12).

Section 5 is devoted to the outstanding question of irreversibility. There Jean explains in a simple way how irreversibility shows up in Boltzmann kinetic theory, it is because his operator $C(t)$ has to be taken at t tending to plus infinity to derive the kinetic equation, whereas reversibility applies only for finite times. Jean makes an interesting connection between the Mayer expansion at equilibrium and the calculation of the correlations out of equilibrium at low densities.

Jean insists well that various assumptions necessary to derive even the standard Boltzmann kinetic equation may be invalid. Actually it was discovered [4] slightly after the writing of the Notes that, out of equilibrium, a specific phenomenon occurs, absent at equilibrium, namely the long range propagation of disturbances via the hydro-dynamical modes. Because of that there is no local kinetic theory in 2D fluids (and in 1D also!). There is an allusion to this kind of long range propagation of nonequilibrium correlations in the Notes when referring to the article by Cohen and Dorfman [5] on page 26 in the conclusion section without saying precisely what is involved and by referring to an “opinion”. From this reference it seems that Jean refers to the discovery of long range cycles of collisions between particles interacting with short range forces, like hard spheres (in 3D) or discs (in 2D). It had been discovered that, for instance in 3D, four hard spheres can make a cycle of collisions of size as big as wished because of the possibility that two spheres making an initial encounter can meet again by being thrown back to each other by collisions with a few other spheres. At second collision such a re-collision event makes invalid the Stosszahlansatz of Boltzmann necessary to derive his kinetic equation, because this ansatz implies that the two colliding particles are statistically independent before the collision.

This makes the situation of nonequilibrium gases far more complex than at equilibrium where the range of correlation is the same as the range of the interaction potential. As was shown slightly later than the paper [5], there is another mechanism of long range

propagation of correlations in nonequilibrium fluids. It results from the hydrodynamic modes, always present in a fluid. Because of that the transport coefficients in 2D fluids diverge (logarithmically), whereas the density expansion of transport coefficients in 3D gets beyond a finite order contributions depending logarithmically on the density.

At about the time where the Notes were written, other attempts were made to develop a formalism enabling to study nonequilibrium situations, based on molecular dynamics like Boltzmann kinetic theory but without assuming a dilute gas and so—hopefully—giving access to chemical physics of dense media and to a more global understanding of the status of irreversibility. Such attempts were made by Prigogine and his group in Brussels. This is developed for instance in the book by Balescu [6]. This book includes a highly original part on quantum systems and derives from scratch the Boltzmann–Nordheim kinetic equation for quantum gases, fermionic and bosonic. The general philosophy of the approach of problems of kinetic theory by the Brussels school can perhaps be summarized by saying that besides the change of the mean values, changes in the correlations are also taken into account if their time scale is smaller than the one of the mean values. In other terms, the correlations are created by quick events like the two body collisions in Boltzmann kinetic theory. This constraint is quoted in the Notes, but, as we just explained, it may be of dubious validity outside of the case of dilute gases because of either the long cycles of re-collisions [5] or the long range propagation of hydrodynamic modes [4].

2 English Summary of Jean Ginibre’s manuscript, presented by Y. Pomeau

This summary of the unpublished Notes written by Jean Ginibre is numbered according to the sections of the original text (written in french) which is presented in Sec. 3. Moreover the references quoted here are postponed at the end of the paper, most of them are taken from the original text.).

2.1 Introduction

As rightly said by the author, Liouville equations are too complex to be useful. Kinetic theory yields a “simplified” picture of gas/fluid dynamics involving a distribution function for one particle. Boltzmann kinetic equation was derived by him by using a statistical argument foreign to a purely mechanical picture. References [2], [7] to [10] did look at possible derivations of Boltzmann kinetic equation directly from the Liouville equation and its BBGKY consequence. The most systematic (and earliest) derivation is by Bogoliubov [2], and it relies on various conjectures of validity hard to check. This essay is to formulate clearly the assumptions behind such a derivation by displaying as concisely as possible the algebraic structure of the theory.

Section 1 explains the notations, based on ref [11]. Section 2 introduces the BBGKY hierarchy and solves it formally. Section 3 explains the principle of the theory in the simplest possible way. Section 4 displays Bogoliubov derivation of the Boltzmann kinetic equation. Section 5 explains how irreversibility sets in by starting from formally reversible dynamical equations. Section 6 explains the relationship between the theory of Bogoliubov and the works of Green [9] and Cohen [10].

2.2 Preliminaries

This section introduces the formalism used in the Notes. Compared to the expositions of BBGKY theory and particularly to Bogoliubov [2], this formalism is quite different. This

goes far beyond trivial changes of notations but implies also an attempt to put things in a far more abstract framework than usual in this field.

The fundamental object there is denoted as E_m and is the set of real functions depending on positions and momenta of m classical particles. Moreover, the functions are symmetrical under permutation of particle indices. The functions in E_m are measurable by the Liouville measure, which implies that integrals of functions in E_m over space and momenta converge. E , the direct product of the E_m 's, is endowed of a structure of algebra thanks to the \star product defined in Eq. (1-2), an interesting and I believe original idea that streamlines many calculations done later. Thanks to this algebraic structure, one can define an application in E , called Γ and defined in Eq. (1-5).

The next five examples have partly a pedagogical purpose, well deserved, and give, if possible, some agility for the algebraic manipulations to come. Examples 1 to 3 are devoted to the operator Γ . Example 4 introduces a new operator P , and Example 5 introduces others, denoted as Δ , Φ , H_0 , R , P , and P^{-1} used in later calculations.

2.3 The equation of motion and its formal solution

The equation solved is the Liouville equation. An added complexity there is that the constraint of a fixed number of particles is dropped, which somehow extends the usual grand canonical ensemble of equilibrium thermodynamics to nonequilibrium. The basic element of the analysis becomes the function $\rho_\Lambda(X)$ with the dynamical equation given in Eqs. (2-5) and (2-6). The Liouville equation is Eq. (2-8). It assumes an interaction potential $V(\cdot)$ fairly general that may involve more than two particles.

The fundamental operator of evolution is U^t defined in Eq. (2-30) and so to speak computed in Eqs. (2-32) and (2-33). As noticed a bit later (at the very end of Sect. 2), the convergence of the developments introduced in Eq. (2-32) is not certain, by far! The final result of this section is Eq. (2-47), completed by (2-48). This is an outstanding result that extends formally relations known at equilibrium to out of equilibrium situations, as pointed out by the author. Indeed the well-known limitation [12] in the validity of this kind of extension is that outside of equilibrium correlations tend to be far more long ranged than at equilibrium because of the propagation of perturbations at distances of order of the mean free path in dilute gases or even at infinite distances by hydrodynamic fluctuations in denser media.

2.4 The correlation equation and the kinetic equation

This section is devoted to the derivation of “the kinetic equation”. Its range of applicability is limited by the assumption that the number density is small, meaning practically that some sort of Boltzmann kinetic equation will be the final result.

The beginning of this section outlines what is meant by “kinetic equation”. This implies (even though the word is not used) an adiabatic assumption of synchronization of solutions of the full dynamical problem with the one body distribution denoted as $f(x)$. It states also that this is true in the limit of a small density, where practically the kinetic equation is Boltzmann kinetic equation. Differently from the usual derivations of Boltzmann kinetic equation, the author begins by computing a correlation operator, denoted as C , which yields the full distribution ρ as a function of F and lastly of f (Eq. 3-1). The author derives then the closed equation (3-10) for the time derivative of C . By integration this gives C , and by inserting the result into Eq. (3-4) one should get the kinetic equation.

Even though this calculation is formally exact, at the end the kinetic equation is derived by inserting into Eq. (3-4) the operator $C(t)$ computed for t tending to $+\infty$. In standard derivations of Boltzmann kinetic equation, this amounts to putting in the collision operator the scattering data of the two body problem to get changes of the velocity distribution at time scales much longer than the duration of a two body collision.

The last paragraph explains the relationship between the method of derivation of the Notes and that of Zwanzig [13]. The difference lies in the linearity assumed by Zwanzig that does not hold true.

2.5 The interaction representation and the point of view of Bogoliubov

This section is about the effective derivation of the kinetic equation in the aforementioned limits. This is done in interaction representation, where the leading order is the hamiltonian for noninteracting particles and the perturbation comes from the two body interaction. The operator C' is derived from Eqs. (4-9) and (4-10). After integration with respect to time, one obtains an expression of $C(\infty)$, which is the same as the one given by Bogoliubov, and finally agrees at the end with Boltzmann kinetic operator. At the end of Sect. 4, there is a table of correspondence between the equation of this section and the equations in Bogoliubov paper [2]. This comparison should be helpful for everybody wishing to understand better the link between the original derivations of Boltzmann kinetic equation and the ones based on the BBGKY hierarchy or directly the Liouville equations as in the Notes.

2.6 The problem of irreversibility

The way irreversibility does appear in kinetic theory is of course central to the subject since the discussions following Boltzmann's work. A good introduction to the historical aspects of this can be found in the second book of S.G. Brush on kinetic theory [14] that includes the original papers or English translation of articles by Poincaré, Zermelo and the answers by Boltzmann himself. Technically, and as noticed in this section, irreversibility sets in because of the substitution of $C(\infty)$ for $C(t)$ in the equations, something necessary to get an explicit equation at the end that is local in time, namely such that one integrates over time the pair correlation created by binary collisions, assuming there is none *before* the collision. This is the well-known "Stosszahlansatz" by Boltzmann, equivalent to assuming that before they meet particles are uncorrelated or have no knowledge of each other. The way this Stosszahlansatz is formulated (the word however does not appear) is interesting because it displays very explicitly how irreversibility sets in in the analysis, although generally it is only seen as a final result of all the assumptions made without linking it precisely to the step where it appears.

2.7 Formal solution of the equation for correlations

The purpose of this section is to explain, by formal analogy of the theory developed so far with equilibrium statistics, that the correlations created by the interaction of particles can be found explicitly.

This section exposes the principle of the derivation of the Boltzmann equation from the result derived in Sect. 5. This requires the computation of the operator $C(\infty)$, which is done in this section, with the final result given in Eq. (6-18).

2.8 Conclusion

This concluding section is very far reaching, given the time where the Notes were written. It says rightly that the convergence of the formal expansions introduced in the derivation of the kinetic equation is at least dubious and concludes that “an important work” remains to be done in this respect. Looking retrospectively it is right that the Notes and other works done later show that so-called long tails pop up in kinetic theory as soon as one goes beyond the limit of a very dilute gas, where Boltzmann kinetic theory applies. But this is another story, and we refer the interested reader to ref [12] that lists relevant publications on this topic.

3 The manuscript by Jean Ginibre

La Théorie Cinétique sans peine

J. Ginibre^{*}

Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies
Faculté des Sciences d'Orsay

TH/150

Mai 1966

* Adresse postale : Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies,
Bâtiment 211, Faculté des Sciences, 91 Orsay, France.

INTRODUCTION

Dans le cadre de la Mécanique Statistique hors d'équilibre, il est usuel de décrire un système classique par une densité de probabilité dans l'espace de phase. Cette densité satisfait l'équation de Liouville, déduite des équations de Hamilton et de la conservation de la probabilité au cours du temps. Cette description étant trop compliquée pour être commode, et contenant en général trop d'information, on est conduit à utiliser une description simplifiée en termes de la fonction de distribution d'une particule. C'est l'objet de la théorie cinétique, dont l'élément de base est l'équation d'évolution de cette fonction, ou équation cinétique, qui n'est autre que l'équation de Boltzmann. La démonstration classique de cette équation repose sur des arguments de probabilité étrangers à la description plus détaillée, qui est purement mécanique. Aussi est-ce un problème important de déterminer dans quelle mesure et comment le second point de vue peut être déduit du premier, et plus précisément de démontrer, éventuellement en la généralisant, l'équation de Boltzmann à partir de l'équation de Liouville. De nombreux auteurs [1, 3, 4, 5] ont attaqué le problème en utilisant dans une étape intermédiaire une hiérarchie d'équations pour les fonctions de corrélation du système, ou équations de B B G K Y. La méthode la plus systématique est celle de Bogoliubov [1], complétée par les travaux de Green [4] et Cohen [5]. La théorie est encore à un stade assez rudimentaire, en ce sens que des conjectures difficiles à vérifier doivent être faites sur le comportement qualitatif du système, et que la proportion de résultats démontrés est très faible. En revanche, il est assez facile d'analyser la structure algébrique de la théorie de façon assez détaillée pour pouvoir formuler clairement conjectures et problèmes. Le présent exposé décrit de façon aussi synthétique que possible ce dernier aspect du problème. Il s'appuie essentiellement sur les références [1] d'une part, [4] et [5] d'autre part, entre lesquelles l'introduction d'un opérateur de corrélation [4] établit un lien très naturel. L'utilisation systématique de notations vectorielles appropriées permet de maintenir les complications algébriques dans des limites raisonnables.

La section 1 est consacrée à l'exposé de ces notations, et s'inspire largement de la référence [6]. Dans la section 2, on démontre et résout formellement la hiérarchie. La section 3 expose le principe de la théorie sous sa forme

la plus simple. La section 4 décrit le point de vue de Bogoliubov et montre son équivalence avec le précédent. La section 5 traite du problème de l'irréversibilité et met en lumière le coup de pouce qui l'introduit. La section 6, plus technique, déduit par un calcul direct les résultats de Green et de Cohen de ceux de Bogoliubov.

1.- PRELIMINAIRES

On s'intéresse à un système de particules classiques de masse 1 dans l'espace euclidien. Une particule est caractérisée par le couple $x = (q,p)$ formé par sa position $q \in R^v$ et son impulsion $p \in R^v$. Des familles finies de tels points dans R^{2v} seront notées $X = x^m = (x_1, \dots, x_m)$, $Y = y^n = (y_1, \dots, y_n)$, etc. En particulier, m et n désigneront toujours le nombre de points dans X et Y respectivement. La notation $Y \subset X$ signifiera que Y est une sous-famille de X , et $X-Y$ désignera alors la sous-famille complémentaire. $X+Y$ désignera la réunion de X et Y .

Soit E_m l'espace des fonctions réelles totalement symétriques de m variables dans R^{2v} , satisfaisant les conditions suivantes :

- (1) Elles sont mesurables pour la mesure de Liouville :

$$dX = \prod_{i=1}^m dx_i = \prod_{i=1}^m dp_i dq_i \tag{1-1}$$

- (2) Quand les (p_i) sont fixés, elles sont uniformément bornées en (q_i) .
- (3) Quand les (q_i) sont fixés, elles tendent vers zéro rapidement quand les p_i tendent vers l'infini.

On pourra, en cas de besoin, imposer une condition de régularité plus forte que (1).

Soit E le produit direct des E_m . Un élément φ de E est une suite de fonctions d'un nombre croissant de variables : $\varphi = (\varphi(\emptyset) = \varphi_0, \varphi(x),$

$\varphi(x_1, x_2, \dots)$, ou, autrement dit, une fonction définie sur l'ensemble

$$\mathcal{R} = \bigcup_{m=0}^{\infty} (\mathbb{R}^{2V})^m.$$

E est un espace vectoriel réel, et présente une certaine analogie avec l'espace de Fock d'un système de bosons. Ce dernier est en fait l'algèbre tensorielle symétrique construite sur l'espace à une particule. Ici aussi, il est utile de définir une structure d'algèbre sur E en introduisant un produit noté $*$ et défini, pour $\varphi \in E$ et $\psi \in E$, par :

$$(\varphi * \psi)(X) = \sum_{Y \subset X} \varphi(Y) \psi(X - Y). \tag{1-2}$$

E muni du produit $*$ est une algèbre commutative avec une unité $\mathbb{1} = (1, 0, 0, \dots)$. Soit E^+ le sous espace formé des $\varphi \in E$ pour lesquels $\varphi_0 = 0$. On définit une application Γ de E^+ dans $\mathbb{1} + E^+$ comme l'*-exponentielle :

$$\Gamma \varphi = \mathbb{1} + \varphi + \frac{1}{2!} \varphi * \varphi + \dots \tag{1-3}$$

On vérifie facilement que

$$\Gamma \varphi(X) = \sum_{X=X_1+\dots+X_r} \varphi(X_1) \dots \varphi(X_r) \tag{1-4}$$

où la somme porte sur toutes les partitions de X en sous familles X_1, \dots, X_r . Comme $\varphi_0 = 0$, la somme dans (1-4) comporte un nombre fini de termes, et est donc bien définie.

Exemple 1. Soit $a \in E_1$ et $\varphi = (0, a(x), 0, \dots)$. Alors

$$\Gamma \varphi(X) = a(x_1) \dots a(x_m). \tag{1-5}$$

Exemple 2. Soit $a \in E_2$ et $\varphi = (0, 0, a(x_1, x_2), 0, \dots)$. Alors, pour m impair, $\Gamma \varphi(X) = 0$. Pour m pair, $\Gamma \varphi(X)$ est la somme sur les partitions de X en couples du produit des valeurs de a pour les $m/2$ couples de la partition. Cette quantité est connue sous le nom de hafnien.

Exemple 3. Soit $\rho = (1, \rho(x_1), \rho(x_1, x_2), \dots) \in \mathbb{1} + E^+$ la suite des fonctions de corrélation d'un système.

5

Posons

$$\rho = \Gamma X \tag{1-6}$$

ou

$$\begin{aligned} \rho(x) &= X(x) \\ \rho(x_1, x_2) &= X(x_1, x_2) + X(x_1) X(x_2) \text{ etc.} \end{aligned} \tag{1-7}$$

Les composantes de X sont les fonctions d'Ursell. La relation inverse :

$$X = \Gamma^{-1} \rho \tag{1-8}$$

peut être explicitée facilement au moyen du développement de $\text{Log}(1 + u)$ en série de u .

On considère maintenant des opérateurs dans l'espace E . Négligeant toute question de convergence, on les supposera représentables par une double suite de noyaux intégraux faisant passer de E_n à E_m (n et m entiers ≥ 0) :

$$A = (A(X | Y)).$$

On aura alors, pour $\varphi \in E$, et sous réserve de convergence :

$$A \varphi(X) = \sum_n \frac{1}{n!} \int dY A(X | Y) \varphi(Y) \tag{1-10}$$

ou, plus brièvement :

$$A \varphi(X) = \int dY A(X | Y) \varphi(Y) \tag{1-11}$$

on posant

$$\sum_n \frac{1}{n!} \int dY = \int dY. \tag{1-12}$$

Le facteur $\frac{1}{n!}$ est imposé par l'esthétique. Il assure en particulier que pour toute suite $\Psi = (\Psi(X | Y)) \in E \otimes E$ de fonctions de deux familles de variables pour laquelle les deux membres ont un sens :

$$\int dX \sum_{Y \subset X} \Psi(Y | X-Y) = \int dX \int dY \Psi(X | Y). \tag{1-13}$$

On définit dans l'espace \mathcal{L} des opérateurs sur E un produit $*$ par :

6

$$A * B(X | Y) = \sum_{X' \subset X} \sum_{Y' \subset Y} A(X' | Y') B(X-X' | Y-Y') . \tag{1-14}$$

Ce produit définit une structure d'algèbre commutative avec une unité. Celle-ci a toutes ses composantes nulles sauf la composante $(m = 0, n = 0)$ qui vaut 1. On note cette unité $\mathbb{1}$. On note \mathcal{L}^+ son supplémentaire naturel dans \mathcal{L} , et on définit une application Γ de \mathcal{L}^+ dans $\mathbb{1} + \mathcal{L}^+$ comme l'*-exponentielle.

Exemple 4. L'opérateur de projection sur \mathbb{E}_1 , soit Π , est défini par

$$\Pi \varphi = (0, \varphi(x), 0, 0, \dots) \text{ pour } \varphi = (\varphi_0, \varphi(x), \varphi(x_1, x_2), \dots).$$

Il a toutes ses composantes nulles sauf la composante $m = 1, n = 1$, qui est :

$$\Pi(x | y) = \delta(x - y) . \tag{1-15}$$

Exemple 5. L'opérateur identité dans \mathbb{E} , soit Δ , a pour composantes :

$$\begin{cases} \Delta(X | Y) = 0 & \text{si } m \neq n \\ \Delta(X | Y) = \sum \delta(x_1 - y_{i_1}) \dots \delta(x_m - y_{i_m}) & \text{si } m = n \end{cases} \tag{1-16}$$

où la somme porte sur les $m!$ permutations des y_{i_j} . Le facteur $m!$ ainsi introduit compense celui qui résulte de la définition (1-10). On vérifie que :

$$\Delta = \Gamma \Pi . \tag{1-17}$$

Ces deux exemples seront fréquemment utilisés par la suite.

On définit ensuite deux opérateurs P et R par :

$$P \varphi(X) = \int dx \varphi(X + x) \tag{1-18}$$

$$R = e^P \tag{1-19}$$

ou, ce qui est équivalent

$$R \varphi(X) = \int dY \varphi(X + Y) . \tag{1-20}$$

P et R ne sont pas définis dans \mathbb{E} entier, mais seulement sur les φ satisfaisant certaines conditions d'intégrabilité. R s'inverse facilement :

7

$$R^{-1} = e^{-P}$$

$$\text{ou } R^{-1} \varphi(X) = \sum_n \frac{(-)^n}{n!} \int dY \varphi(X + Y) . \tag{1-21}$$

On considérera par la suite des particules qui interagissent par des potentiels à m corps $V(X)$, où $2 \leq m \leq r$. Il est commode de poser $V(x) = p^2/2$ et $V(X) = 0$ pour $m = 0$ et $m > r$. On note $\mathcal{H}(X)$ la fonction de Hamilton des m particules X , et $\{.,.\}$ le crochet de Poisson. On définit deux opérateurs ϕ et H_0 par

$$\phi \varphi(X) = \{V(X), \varphi(X)\} \tag{1-22}$$

$$H_0 \varphi(X) = \{\mathcal{H}(X), \varphi(X)\} . \tag{1-23}$$

De la relation :

$$\mathcal{H}(X) = \sum_{Y \subset X} V(Y) \tag{1-24}$$

on déduit facilement :

$$H_0 = \phi * \Delta . \tag{1-25}$$

Les opérateurs Δ , ϕ et H_0 conservent le nombre de particules, tandis que les opérateurs R , P et R^{-1} le diminuent.

2.- L'EQUATION D'EVOLUTION ET SA SOLUTION FORMELLE

On établit maintenant pour la famille ρ des fonctions de corrélation d'un système, la hiérarchie des équations de BBGKY. Ce système d'équations sera considéré comme une équation vectorielle dans E , et appelé par la suite équation d'évolution.

On considère d'abord un système enfermé dans une boîte bornée Λ . On considérera à cet effet que le hamiltonien $\mathcal{H}_\Lambda(X)$ contient un potentiel à un corps, positif, et qui devient infini sur la frontière de la boîte.

Le système serait décrit, si on connaissait exactement le nombre de particules m , par une densité de probabilité $\sigma(X)$, à support dans la boîte Λ , et évoluant suivant l'équation de Liouville. On supposera plus généralement que le nombre de particules n'est pas connu exactement, et que le système est décrit par

une suite $\sigma \in E$ de densités de probabilité, la composante $\sigma(X)$ étant la densité de probabilité pour que :

- 1) il y ait exactement m particules dans la boîte,
- 2) ces particules soient aux points décrits par X .

On choisit la normalisation suivante des différentes composantes de σ :

$$\int dY \sigma(Y) = 1. \tag{2-1}$$

Les composantes de σ évoluent de façon indépendante suivant l'équation de Liouville :

$$\frac{\partial \sigma(X)}{\partial t} = \{ \mathcal{H}_\Lambda(X), \sigma(X) \}. \tag{2-2}$$

Les fonctions de corrélation du système sont définies par :

$$\rho_\Lambda(X) = \int dY \sigma(X + Y). \tag{2-3}$$

Ce sont donc les composantes d'un vecteur $\rho_\Lambda \in E$ défini par

$$\rho_\Lambda = R\sigma. \tag{2-4}$$

Substituant (2-2) dans (2-3), on trouve :

$$\frac{\partial \rho_\Lambda(X)}{\partial t} = \int dY \{ \mathcal{H}_\Lambda(X + Y), \sigma(X + Y) \}. \tag{2-5}$$

Mais :

$$\mathcal{H}_\Lambda(X + Y) = \mathcal{H}_\Lambda(X) + \mathcal{H}_\Lambda(Y) + \sum_{\emptyset \neq S \subset X} \sum_{\emptyset \neq T \subset Y} v(S + T) \tag{2-6}$$

Le premier terme donne une contribution $\{ \mathcal{H}_\Lambda(X), \rho_\Lambda(X) \}$.

Le second terme ne contribue pas, car le crochet de Poisson introduit une dérivation par rapport à une variable, qui est suivie d'une intégration sur la même variable. Il en résulte un terme de surface, qui est nul :

- si la variable est un p , parce que les fonctions considérées décroissent rapidement quand $|p|$ tend vers l'infini,

- si la variable est un q , parce que le potentiel qui enferme les particules dans la boîte fait tendre les densités σ vers 0 sur la frontière de celle-ci.

Il reste donc

$$\frac{\partial \rho_\Lambda(x)}{\partial t} = \left\{ \mathcal{H}_\Lambda(x), \rho_\Lambda(x) \right\} + \sum_{\substack{S \neq \emptyset \\ S \subset X}} \int dY \sum_{\substack{T \neq \emptyset \\ T \subset Y}} \left\{ V(S+T), \sigma(X+Y) \right\}. \quad (2-7)$$

On peut utiliser (1-13) dans le dernier terme, à la restriction près que T doit être non vide (les termes avec $T = \emptyset$ ont été inclus dans le premier terme).

L'intégration sur $Y-T$ donne alors $\rho(X+T)$. Finalement :

$$\frac{\partial \rho_\Lambda(x)}{\partial t} = \left\{ \mathcal{H}_\Lambda(x), \rho_\Lambda(x) \right\} + \sum_{S \subset X} \sum_{\ell \geq 1} \frac{1}{\ell!} \int dT \left\{ V(S+T), \rho_\Lambda(X+T) \right\} \quad (2-8)$$

où ℓ est le nombre de particules dans T , et où la restriction $S \neq \emptyset$ a été omise, car la contribution des termes $S = \emptyset$ est nulle, comme on l'a vu plus haut.

On prend maintenant formellement la limite du volume infini. ρ_Λ est remplacé par ρ dont le support s'étend à tout l'espace, et le terme de potentiel extérieur dans \mathcal{H}_Λ disparaît. Il reste :

$$\frac{\partial \rho(x)}{\partial t} = \left\{ \mathcal{H}(x), \rho(x) \right\} + \sum_{S \subset X} \sum_{\ell \geq 1} \frac{1}{\ell!} \int dT \left\{ V(S+T), \rho(X+T) \right\}. \quad (2-9)$$

La dérivée partielle par rapport à t est la composante à m particules de la dérivée du vecteur $\rho \in E$. Le premier terme du second membre est la composante à m particules du vecteur $\rho \in E$. Le second membre entier est la composante à m particules d'un vecteur $H\rho$, où H est un opérateur linéaire dans E qu'on va préciser. L'équation d'évolution (2-9) s'écrit alors, en notations vectorielles:

$$\frac{d\rho}{dt} = H\rho. \quad (2-10)$$

On déduit facilement de (1-20, 22) que :

$$R \phi \varphi(x) = \int dY \left\{ V(X+Y), \varphi(X+Y) \right\}. \quad (2-11)$$

Comparant (1-14, 16) avec (2-9, 11), on obtient :

$$H = R \phi * \Delta \quad (2-12)$$

(2-10) et (2-12) constituent l'équation d'évolution.

On va maintenant "résoudre" formellement cette équation, en un sens qui sera clair plus loin. On suppose résolu le problème du mouvement de m particules isolées pour m quelconque ; autrement dit, on suppose connu l'opérateur :

$$U_0^t = e^{tH_0} \quad (2-13)$$

La solution formelle est alors suggérée par la comparaison de (2-2,4,10). Si on pouvait prendre la limite du volume infini dans (2-2) et (2-4), on trouverait $\rho = R \sigma$, $d\sigma/dt = H_0 \sigma$, et par suite

$$\frac{d\rho}{dt} = R H_0 R^{-1} \rho \quad (2-14)$$

La limite du volume infini n'a pas de sens pour σ . La condition (2-1) indique que σ tend vers zéro. Cependant, l'argument suggère le résultat correct, qui est l'équation (2-14). Il suffit alors de montrer que

$$H = R H_0 R^{-1} \quad (2-15)$$

La démonstration de (2-15), exposée ci-dessous, revient dans une certaine mesure à parcourir en sens inverse la démonstration de (2-10) à partir de (2-2). Le résultat cherché peut s'énoncer sous la forme suivante :

Lemme 1

$$R(A * \Delta) R^{-1} = R A * \Delta \quad (2-16)$$

Démonstration.

On doit vérifier une identité entre noyaux intégraux. Il est commode de le faire en deux étapes. On montre d'abord que :

$$R(A * B) = R A * R B \quad (2-17)$$

En effet :

$$\begin{aligned}
 R(A*B)(X | Y) &= \int dS (A*B)(X+S | Y) \\
 &= \sum_{X' \subset X} \sum_{Y' \subset Y} \int dS' \int d(S-S') A(X'+S' | Y') B(X-X'+S-S' | Y-Y') \\
 &= (RA * RB)(X | Y)
 \end{aligned} \tag{2-18}$$

On montre ensuite que :

$$(A * R) R^{-1} = A * \Delta . \tag{2-19}$$

En effet, les noyaux intégraux de R sont :

$$R(X | Y) = \int dT \Delta(X+T | Y) \tag{2-20}$$

et de même :

$$R^{-1}(X | Y) = \int dT (-)^{\ell} \Delta(X+T | Y) \tag{2-21}$$

où ℓ est le nombre de points de T . On a alors :

$$\begin{aligned}
 (A * R) R^{-1} (X | Y) &= \sum_{X' \subset X} \int dT' \int dS A(X-X' | S) R^{-1} (X'+S+T' | Y) \\
 &= \sum_{X' \subset X} \int dS A(X-X' | S) \int dT' \int dT'' (-)^{\ell''} \Delta(X'+S+T'+T'' | Y)
 \end{aligned} \tag{2-22}$$

en utilisant (2-21). ℓ'' est le nombre de points de T'' . On pose $T = T' + T''$:

$$\dots = \sum_{X' \subset X} \int dS A(X-X' | S) \int dT \sum_{T' \subset T} (-)^{\ell-\ell'} \Delta(X'+S+T | Y) \tag{2-23}$$

en utilisant (1-13). La somme sur T' est nulle sauf pour $\ell = 0$, auquel cas elle vaut 1.

$$\dots = \sum_{X' \subset X} \int dS A(X-X' | S) \Delta(X'+S | Y) . \tag{2-24}$$

En vertu de (1-16), l'intégration sur S est immédiate et donne :

$$\dots = \sum_{X' \subset X} \sum_{Y' \subset Y} A(X-X' | Y-Y') \Delta(X' | Y') \tag{2-25}$$

$$= (A * \Delta) (X | Y) . \tag{2-26}$$

On démontre enfin le lemme :

$$R(A * \Delta) R^{-1} = (R A * R \Delta) R^{-1} \tag{2-27}$$

en vertu de (2-17)

$$\begin{aligned} &= (R A * R) R^{-1} \\ &= R A * \Delta \end{aligned} \tag{2-28}$$

en vertu de (2-19).

Une certaine prudence est requise dans l'utilisation de résultats intermédiaires. En particulier, si (2-16) peut être appliqué à des φ dans E qui sont seulement des fonctions bornées des (q_i) , par contre (2-17) et (2-19) ne pourront être appliquées en général qu'à des φ satisfaisant des conditions supplémentaires d'intégrabilité. (2-17) et (2-19) ne sont considérées ici que comme des identités algébriques entre noyaux intégraux. Cette remarque est une autre façon de formuler l'absence de limite pour σ quand le volume devient infini.

(2-16) appliqué à $A = \phi$, compte tenu de (1-24) et (2-12), donne immédiatement (2-15).

La solution formelle de (2-10) est alors :

$$\rho(T) = U^\dagger \rho(0) \tag{2-29}$$

avec :

$$U^\dagger = e^{tH} = R U_0^\dagger R^{-1} . \tag{2-30}$$

Si on pose :

$$(\text{ad } P) A = [P, A] \tag{2-31}$$

(2-30) peut s'écrire :

$$U^\dagger = \exp(\text{ad } P) U_0^\dagger = \sum_{k=0}^{\infty} U_k^\dagger \tag{2-32}$$

avec :

$$U_k^\dagger = \frac{1}{k!} (\text{ad } P)^k U_0^\dagger . \tag{2-33}$$

Cette décomposition classe les termes de U^\dagger d'après la décroissance du nombre de particules. Le terme U_k^\dagger diminue ce nombre de k , c'est-à-dire fait passer de

E_n à E_{n-k} . Il est instructif d'expliciter le premier terme non trivial U_1^t . On note $Y(t)$ la configuration de n points déduite de la configuration initiale Y par le mouvement des n particules, en interaction entre elles, mais sans interactions avec l'extérieur, pendant un intervalle de temps t . U_0^t décrit précisément cette propagation, et par suite :

$$U_0^t(X|Y) = \Delta(X|Y(t)). \tag{2-34}$$

Appliquant alors la relation :

$$[P, A](X|Y) = \int dx A(X+x|Y) = \sum_{i=1}^n A(X|Y_i) \tag{2-35}$$

où $Y_i = Y - y_i$, et introduisant une intégration artificielle, on obtient :

$$U_1^t(X|Y) = \int dx \left\{ \Delta(X+x|Y(t)) - \sum_{i=1}^n \Delta(X|Y_i(t)) \delta(x|y_i(t)) \right\}. \tag{2-36}$$

Le premier terme décrit la propagation de $n = m + 1$ particules en interaction. Le second décrit la propagation des mêmes particules lorsqu'on a supprimé l'interaction de la particule supplémentaire associée à x avec les m autres. Si les potentiels d'interaction ont une portée finie, on en déduit facilement que pour X fixé, l'intégration sur $x = (q, p)$ n'est à faire, pour p fixé, que sur une région bornée en q . Par suite, les conditions (1), (2) et (3) de la section 1 suffisent à assurer que $\varphi \in E$ est dans le domaine de définition de U_1^t . L'argument s'étend à U_k^t pour k quelconque. On indique ici seulement le premier pas dans cette direction. On omet l'indice t dans les U_k^t . On déduit facilement des définitions que :

$$R A R^{-1}(X|Y) = \sum_{T \subset Y} (-)^{n-l} f dS A(X+S|T) \tag{2-37}$$

où l est le nombre de particules dans T . Par suite [7] :

$$U(X|Y) = \sum_{T \subset Y} (-)^{n-l} f dS U_0(X+S|T) \tag{2-38}$$

U_0 appartient à $\mathbb{1} + \mathcal{L}^+$, et par suite admet un *-inverse qu'on note \tilde{U}_0 et qu'on peut définir, par exemple, par :

$$\tilde{U}_0 = \Gamma(-\Gamma^{-1}(U_0)). \tag{2-39}$$

Par exemple :

$$\begin{aligned} \tilde{U}_0(x|y) &= -U_0(x|y) \\ \tilde{U}_0(x_1x_2|y_1y_2) &= 2(U_0(x_1|y_1)U_0(x_2|y_2) + U_0(x_1|y_2)U_0(x_2|y_1)) \\ &\quad - U_0(x_1x_2|y_1y_2) \end{aligned} \tag{2-40}$$

En utilisant (2-17) et la relation évidente :

$$R U_0(\emptyset|Y) = 1 \quad \text{pour tout } n, \tag{2-41}$$

on peut montrer successivement que :

$$R \Gamma^{-1}(U_0)(\emptyset|Y) = \delta_{n1} \tag{2-42}$$

et que :

$$R \tilde{U}_0(\emptyset|Y) = (-1)^n \quad \text{pour tout } n. \tag{2-43}$$

Par suite, on peut, en introduisant une intégration artificielle dans (2-38), mettre U sous la forme :

$$U(X|Y) = \sum_{T \subset Y} \int dS^T U_0(X+S^T|T) \int dS^T \tilde{U}_0(S^T|Y-T) \tag{2-44}$$

$$U(X|Y) = \int dS \sum_{S' \subset S} \sum_{Y' \subset Y} U_0(X+S'|Y') \tilde{U}_0(S-S'|Y-Y') \tag{2-45}$$

La correspondance avec (2-33) s'exprime par le fait que k est le nombre de points dans S. En particulier, le terme k = 1 de (2-45), compte tenu de (2-40), est identique à (2-36).

La signification des transformations précédentes s'éclaire quand on applique U à un vecteur initial ρ(0) dont les composantes se factorisent [5] :

$$\rho(0) = \Gamma f \quad \text{avec } f \in E_1.$$

De (2-45) et de la relation évidente :

$$(A * B) \Gamma f = (A \Gamma f) * (B \Gamma f) \tag{2-46}$$

on tire aussitôt :

$$\rho(t; \bar{x}) = \int dS \sum_{S' \subset S} g(x + S') g^{-1}(S - S') \quad (2-47)$$

où on a posé :

$$g = U_0^{\dagger} \Gamma f, \quad (2-48)$$

et où g^{-1} est l'* inverse de g . (2-48) est exactement la relation qui exprime les fonctions de corrélation à l'équilibre grand canonique en fonction des facteurs de Boltzmann. $g(x)$ remplace $z^m \exp[-\beta \mathcal{H}(x)]$ [6]. (2-45) permet de généraliser cette relation au cas où $\rho(0)$ est quelconque. L'interprétation de (2-45) en termes de diagrammes connexes permet d'étendre aux U_k l'argument présenté plus haut pour U_1 . Malheureusement, ces considérations laissent sans réponse la difficile question de la convergence du développement (2-32).

3.- L'EQUATION DE CORRELATION ET L'EQUATION CINETIQUE

On se propose maintenant d'établir une équation cinétique, c'est-à-dire une équation d'évolution pour la fonction de corrélation à une particule $\rho(x) = f(x)$. On peut donner des arguments qualitatifs (voir section 4) en faveur de la description suivante de l'évolution du système. A partir de conditions initiales $\rho(0)$ raisonnables, après une première étape difficile à décrire, les fonctions de corrélation à $m \geq 2$ points se synchronisent sur f , c'est-à-dire deviennent des fonctions de f et ne dépendent plus du temps que par l'intermédiaire de f . La durée de cette étape initiale devrait être de l'ordre de quelques temps de collision, et être courte devant les temps caractéristiques d'évolution de f selon l'équation cinétique, qui décrit l'évolution du système après cette étape initiale. Par ailleurs, ces considérations ne sont valables que pour des densités assez faibles [1,2].

Ces deux hypothèses :

- 1) les ρ ($m \geq 2$) sont des fonctions de f ,
- 2) la densité est faible,

suggèrent que le système sera décrit, plus commodément que par ρ , par le couple formé de la fonction à une particule f et d'un opérateur de corrélation C ,

dépendant du temps, et qui définira ρ par

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho = C F \\ \text{où } F = \Gamma f . \end{array} \right. \tag{3-1}$$

L'hypothèse que la densité est faible, et sera éventuellement le paramètre d'un développement en série, amène à admettre que la série dans (3-1) converge, et que d'autre part :

$$C_{mn} = C(X|Y) = 0 \text{ pour } m > n . \tag{3-2}$$

L'opérateur C diminue donc le nombre de particules. Enfin, C satisfait les conditions

$$\left\{ \begin{array}{l} C_{0n} = \delta_{0n} \\ C_{1n} = 0 \text{ pour } n \neq 1 \\ C(x|y) = \delta(x - y) . \end{array} \right. \tag{3-3}$$

L'équation d'évolution se décompose alors en deux :

La composante $m = 1$ devient :

$$\frac{df}{dt} = \Pi H C F . \tag{3-4}$$

Les composantes $m \geq 2$ deviennent :

$$\frac{dC}{dt} F + C \frac{dF}{dt} = H C F . \tag{3-5}$$

Mais

$$\frac{dF}{dt} = F * \frac{df}{dt} \tag{3-6}$$

(dérivée d'une exponentielle). Par suite :

$$\frac{dF}{dt} = F * \Pi H C F \tag{3-7}$$

en substituant (3-4).

17

$$\frac{dF}{dt} = (\Delta * \Pi H C) F \quad (3-8)$$

car F est du type Γf avec $f \in E_1$. Finalement, il vient :

$$\left(\frac{dC}{dt} + C (\Delta * \Pi H C) - H C\right) F = 0 \quad (3-9)$$

Pour que (3-1) soit valable quel que soit t avec un C indépendant de f , il est suffisant d'imposer à C d'obéir à l'équation suivante, appelée par la suite équation de corrélation :

$$\frac{dC}{dt} = H C - C (\Delta * \Pi H C). \quad (3-10)$$

Le problème est maintenant décomposé en deux :

1) La résolution de l'équation de corrélation donne un opérateur $C(t)$. A chaque solution de (3-10) correspond par (3-4) une équation pour f , candidate pour être équation cinétique.

2) $C(t)$ étant choisi, l'évolution du système est décrite par l'équation (3-4).

La description qualitative esquissée au début se formule clairement en termes de C . Elle contient les deux hypothèses suivantes :

a) la solution de (3-10) choisie a une limite quand $t \rightarrow +\infty$.

b) cette limite est atteinte au bout d'un temps de relaxation τ_1 qui est court devant les temps caractéristiques d'évolution de f par (3-4).

La synchronisation s'exprime alors par le fait que pour $t \gg \tau_1$, on remplace la relation (3-1), c'est-à-dire $\rho(t) = C(t) F(t)$, par l'approximation :

$$\rho(t) = C(\infty) F(t) \quad (3-11)$$

obtenant ainsi l'équation cinétique :

$$\frac{df}{dt} = \Pi H C(\infty) F(t) \quad (3-12)$$

La condition initiale la plus naturelle pour (3-10) est $C(0) = \Delta$ [5]. On verra dans la section 6 qu'on peut formellement résoudre (3-10) et obtenir la limite $C(\infty)$.

Pour terminer, on compare la méthode précédente d'obtention de l'équation cinétique avec la méthode utilisée par Zwanzig [8] pour démontrer des équations maîtresses. Le point de départ est analogue : il consiste en une équation linéaire (2-10) pour un vecteur ρ dont seule une partie $f = \Pi\rho$ où $F = \Gamma\Pi\rho$ est intéressante. De plus, on suppose que pour $t = 0$, $G(0) = \Delta$, c'est-à-dire $\rho(0) = F(0)$. La différence essentielle, qui rend la méthode de Zwanzig inapplicable, est que le présumé projecteur $\Gamma\Pi$ n'est pas linéaire. On peut s'affranchir de cette difficulté en travaillant avec $\Gamma^{-1}\rho$, mais c'est alors l'équation qui n'est pas linéaire.

4.- LA REPRÉSENTATION D'INTERACTION ET LE POINT DE VUE DE BOGOLIUBOV

Bogoliubov utilise systématiquement la représentation d'interaction : on note par ' les diverses quantités dans cette représentation, définie de façon usuelle par :

$$\rho(t) = e^{tH_0} \rho'(t) \tag{4-1}$$

$$H_1'(t) = e^{-tH_0} H_1 e^{tH_0} \tag{4-2}$$

où

$$H_1 = H - H_0 . \tag{4-3}$$

On note que H_1' , comme H_1 , diminue strictement le nombre de particules. Un développement en perturbations par rapport à H_1' (ou H_1) est donc un développement en série de la densité d , puisque $\rho(X) \simeq d^m$.

L'équation d'évolution devient :

$$\frac{d\rho'}{dt} = H_1'(t) \rho'(t) . \tag{4-4}$$

En perturbations au premier ordre :

$$\rho'(t) = \rho'(0) + \int_0^t H_1'(\tau) \rho(0) d\tau . \tag{4-5}$$

Soit $\mathcal{K}(X)$ l'énergie cinétique des m particules de X .

$$\mathcal{K}(X) = \sum_{i=1}^m \frac{1}{2} p_i^2 \tag{4-6}$$

et soit K l'opérateur dans E défini par

$$K\varphi(X) = \left\{ \mathcal{G}(X), \varphi(X) \right\}. \tag{4-7}$$

En représentation d'interaction, on a :

$$F(t) = e^{tK} F'(t) \tag{4-8}$$

et par suite

$$C(t) = e^{tH_0} C'(t) e^{-tK}. \tag{4-9}$$

L'équation de corrélation en représentation d'interaction s'obtient à partir de (4-4) comme l'équation (3-10) dans la représentation initiale se déduisait de (2-10). On trouve donc :

$$\frac{dC'}{dt} = H_1' C' - C' (\Delta * \prod H_1' C'). \tag{4-10}$$

On peut également l'obtenir par un calcul direct en substituant (4-9) dans (3-10). La vérification est laissée au soin du lecteur.

La propriété la plus intéressante de cette équation est qu'elle se résout par quadratures :

$$C'(t) = C'(a) + \int_a^t d\tau \left[H_1'(\tau) C'(\tau) - C'(\tau) (\Delta * \prod H_1'(\tau) C'(\tau)) \right] \tag{4-11}$$

Pour cela, on calcule les noyaux intégraux $C'(X|Y)$ par récurrence sur la différence $r = n - m$. H_1' diminue strictement le nombre de particules, et par suite le second terme du membre de droite ne contribue qu'à des valeurs de r strictement plus grandes que celles des composantes de C' qu'on y substitue. On a donc :

- à l'ordre $r = 0$: $C'(t) = C'(a)$

- à l'ordre $r = 1$:

$$C'(t) = C'(a) + \int_a^t d\tau \left[H_1'(\tau) C'(a) - C'(a) (\Delta * \prod H_1'(\tau) C'(a)) \right] \tag{4-12}$$

- à l'ordre r , les seules composantes de C' qui contribuent à l'intégrale sont d'ordre au plus égal à $r - 1$, d'où le résultat.

On est maintenant en mesure de formuler simplement la démarche de Bogoliubov. L'analyse dimensionnelle suggère que la limite supérieure du temps de validité du développement en perturbations (4-5), limite imposée par la condition que les termes séculaires restent petits, est néanmoins grande devant la durée d'une collision. Le plus bas ordre $\rho'(t) = \rho'(0)$ de ce développement, joint au choix de conditions initiales raisonnables pour C' , suggère alors que la description qualitative esquissée au début de la section 3 est correcte. On est alors conduit à chercher les solutions de (3-10) ou plutôt de (4-10), du type décrit ci-dessous. Soit

$$C_0 = \lim_{\tau \rightarrow -\infty} e^{-\tau H_0} e^{\tau K}. \quad (4-13)$$

Pour des potentiels répulsifs et de portée finie, la limite existe : pour chaque configuration de points, la limite $|\tau| \rightarrow \infty$ est illusoire ; les quantités considérées deviennent indépendantes de $|\tau|$ si $|\tau|$ est assez grand, plus précisément si $|\tau|$ est plus grand que le temps pendant lequel les particules de la configuration considérée sont à portée d'interaction. On vérifie que C_0 satisfait les conditions :

$$\begin{cases} e^{tH_0} C_0 = C_0 e^{tK} \\ H_0 C_0 = C_0 K. \end{cases} \quad (4-14)$$

On impose alors les conditions suivantes :

$$(1) \quad c(t) = c(0) \quad (= C'(0)), \quad (4-15)$$

c'est-à-dire : $C(t)$ est indépendant du temps.

(2) La limite suivante existe et est égale à C_0 :

$$\lim_{\tau \rightarrow -\infty} e^{-\tau H_0} C(t) e^{\tau K} = C_0 \quad (4-16)$$

On renvoie à la littérature [1, 2] pour la discussion de l'interprétation physique de la condition (2). Il est clair que si (1) est vérifiée, alors (2) est équivalente à (3).

(3) La limite suivante existe et est égale à C_0 :

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} C'(t) = C_0.$$

Réciproquement, si on suppose (3) vérifiée, on obtient C' en résolvant (4-10) par la méthode indiquée précédemment :

$$C'(t) = C_0 + \int_{-\infty}^t dt [H_1'(\tau) C'(\tau) - C'(\tau)(\Delta * \Pi H_1'(\tau) C'(\tau))]. \quad (4-17)$$

Il convient alors de montrer que l'intégrale existe, ce qui est analogue au problème de l'existence de la limite de $C(t)$ pour $t \rightarrow \infty$ dans la méthode décrite dans la section 3 (condition (e)). Si tel est le cas, on voit facilement par récurrence sur $r = n - m$ et en utilisant (4-14), que :

$$C'(t_1) = e^{-(t_1 - t_2)H_0} C'(t_2) e^{(t_1 - t_2)K}, \quad (4-18)$$

ce qui entraîne que C défini par (4-9) est bien indépendant du temps et satisfait donc la condition (1). Par suite, (4-15) et (4-17) fournissent la solution du problème.

Il est instructif de comparer la méthode de Bogoliubov au point de vue plus simple de la section 3, où on cherchait $C(\infty)$ associé à $C(0) = \Delta$. C désignant cette solution de (3-10), on pose, pour $a > 0$:

$$C'_a(t) = e^{-tH_0} C(t+a) e^{tK}. \quad (4-19)$$

$C(t+a)$ satisfait la même équation que $C(t)$, car les coefficients de celle-ci sont indépendants du temps. Par suite, C'_a satisfait la même équation que C' . D'autre part :

$$\begin{cases} C'_a(0) = C(a) \\ C'_a(-a) = e^{aH_0} e^{-aK} \end{cases} \quad (4-20)$$

On s'intéresse à

$$\lim_{a \rightarrow \infty} C(a) = \lim_{a \rightarrow \infty} C'_a(0)$$

tandis que :

$$\lim_{a \rightarrow \infty} C'_a(-a) = C_0.$$

Par suite, sous réserve de la continuité des solutions de (4-10) par rapport aux conditions initiales, C'_a tend vers le C' de Bogoliubov, et par suite $C(a)$ tend

vers le C de Bogoliubov. Les deux méthodes donnent donc, formellement, la même théorie cinétique.

Pour faciliter le travail du lecteur, on termine cette section en donnant la correspondance entre les équations de cet exposé et celles de la référence [1].

- (3-11) \rightarrow (B-9-2,3)
- (3-12) \rightarrow (B-9-4)
- (4-5) \rightarrow (B-8-5)
- (4-16) \rightarrow (B-9-7',8)
- (4-15,17) \rightarrow (B-9-13,15)

5.- LE PROBLEME DE L'IRREVERSIBILITE

L'équation cinétique obtenue donne en première approximation l'équation de Boltzmann [1,2]. Partant d'une équation réversible, on a donc obtenu une équation irréversible. Il est intéressant de voir où l'irréversibilité s'introduit. Ceci apparaît clairement dans la formulation de la section 3. On voit facilement que l'équation (3-4) est réversible, ainsi que (3-10). Plus précisément soit T l'opérateur de renversement du temps :

$$T \varphi ((p_i), (q_i)) = \varphi ((-p_i), q_i). \tag{5-1}$$

Alors

$$\begin{cases} T H T = - H \\ T H_0 T = - H_0 \\ T H_i^*(t) T = - H_i^*(-t) . \end{cases} \tag{5-2}$$

On considère la solution de (3-10) correspondant à $C(0) = \Delta$; de $T \Delta T = \Delta$ et de (5-2), on déduit que :

$$C(t) = T C(-t) T . \tag{5-3}$$

D'où, en substituant dans (3-4) :

$$TH/150 \quad \frac{d\tilde{f}}{dt} = \pi H C(-t) \tilde{F} \tag{5-4}$$

avec

$$\tilde{f}(t) = T f(-t). \tag{5-5}$$

L'irréversibilité s'introduit lors du remplacement de $C(t)$ par $C(\infty)$. Substituant (5-3,5) dans (3-12), on trouve :

$$\frac{d\tilde{f}}{dt} = \text{TH } C(-\infty) \tilde{F}.$$

On voit facilement, par exemple sur la partie diagonale en nombre de particules de $C(t)$, qui est C_0 , que $C(\infty) \neq C(-\infty)$. Par suite, l'équation cinétique (3-12) n'est pas réversible. C'est le remplacement de $C(t)$ par $C(\infty)$ qui introduit l'irréversibilité dans la théorie.

6.- SOLUTION FORMELLE DE L'EQUATION DE CORRELATION

On a vu dans la section 2 qu'on peut résoudre formellement l'équation d'évolution. En particulier, avec la condition initiale $C(0) = \Delta$, c'est-à-dire $\rho(0) = \Gamma f(0)$, la solution est donnée par (2-47) avec g défini par (2-48), ce encore :

$$g = e^{tH_0} e^{-tK} \Gamma f_0(t) \tag{6-1}$$

en posant

$$f_0(t) = e^{tK} f(0). \tag{6-2}$$

La situation est alors la suivante : les fonctions de corrélation s'expriment par des formules analogues à celles de l'équilibre grand canonique, les opérateurs $e^{tH_0} e^{-tK}$ jouant le rôle des facteurs de Boltzmann, et la fonction $f_0(t)$ le rôle de l'activité z . L'opérateur C exprime les ρ ($m \geq 2$) en fonction de $f = \text{TH } \rho$ et s'obtient donc en éliminant f_0 , qu'on exprime au moyen de f . Le problème est donc le même que l'élimination de z à l'équilibre, qui conduit à la série du viriel et aux séries donnant les fonctions de corrélation en fonction de la densité. Il peut être résolu de façon analogue, en introduisant des opérateurs irréductibles analogues aux graphes de Mayer irréductibles. On renvoie pour les détails aux références [4] et [5].

Il est facile de vérifier que la résolution directe de l'équation de corrélation conduit au même point de vue, ce qui complète la comparaison des résultats de [1] et [4],[5]. On peut résoudre cette équation indifféremment dans la représentation d'interaction ou dans la représentation initiale. On choisit cette dernière. On se donne la condition initiale $C(0) = C_1$ satisfaisant (3-1) et (3-2). On élimine facilement le terme $H C$ du second membre de (3-10) en posant

$$C = e^{tH} C_1 M^{-1}. \tag{6-3}$$

Il vient :

$$\frac{dC}{dt} = H C + e^{tH} C_1 \frac{dM^{-1}}{dt} \tag{6-4}$$

d'où

$$e^{tH} C_1 M^{-1} \frac{dM}{dt} M^{-1} = C (\Delta * \Pi H C) \tag{6-5}$$

et par suite :

$$\frac{dM}{dt} = (\Delta * \Pi H e^{tH} C_1 M^{-1}) M \tag{6-6}$$

avec la condition initiale $M(0) = \Delta$. On sait déjà que le problème a une solution unique, d'après (4-11). On va voir que cette solution est du type :

$$M = \Gamma (\Pi M). \tag{6-7}$$

(6-7) détermine la dérivée de M en fonction de celle de ΠM par :

$$\frac{dM}{dt} = M * \frac{d(\Pi M)}{dt} \tag{6-8}$$

(dérivée d'une exponentielle). D'autre part, si M est du type (6-7), l'équation (6-6) se réduit facilement à

$$\frac{dM}{dt} = M * \Pi H e^{tH} C_1. \tag{6-9}$$

En projetant (6-9) sur E_1 , on trouve

$$\frac{d(\Pi M)}{dt} = \Pi H e^{tH} C_1 \tag{6-10}$$

et par suite (6-9) se réduit bien à (6-8). Enfin, à l'instant initial, $M(0) = \Delta$ est bien du type (6-7), d'après (1-17).

L'équation (6-10) se résout immédiatement, compte tenu de la condition initiale et de (3-3), par :

$$\Pi M = \Pi e^{tH} C_1 . \tag{6-11}$$

Finalement, la solution de (3-10) est, d'après (6-3,7,11) :

$$C(t) = e^{tH} C_1 (\Gamma(\Pi e^{tH} C_1))^{-1} . \tag{6-12}$$

Ceci peut encore s'écrire :

$$C(t) = e^{tH} C_1 e^{-tK} (\Gamma(\Pi e^{tH} C_1 e^{-tK}))^{-1} . \tag{6-13}$$

On reconnaît dans (6-13) le résultat de l'élimination de f_0 en fonction de $\Pi \rho$ dans une équation du type :

$$\rho = (e^{tH} C_1 e^{-tK}) \Gamma f_0 \tag{6-14}$$

On a en effet

$$\Gamma \Pi \rho = (\Gamma(\Pi e^{tH} C_1 e^{-tK})) \Gamma f_0 \tag{6-15}$$

dont la composante $m = 1$, obtenue en omettant le Γ de gauche dans les deux membres, est le développement de $\Pi \rho$ en série de f_0 . L'opérateur inverse de $\Gamma(\Pi e^{tH} C_1 e^{-tK})$ est alors le développement des puissances successives de f_0 en série de $\Pi \rho$.

La solution (6-13) se simplifie si $C_1 = \Delta$. On trouve alors :

$$C(t) = e^{tH} e^{-tK} (\Gamma(\Pi e^{tH} e^{-tK}))^{-1} \tag{6-16}$$

$$C(t) = R e^{tH_0} e^{-tK} R^{-1} (\Gamma(\Pi R e^{tH_0} e^{-tK} R^{-1}))^{-1} . \tag{6-17}$$

Quand $t \rightarrow +\infty$, d'après (4-13), $C(t)$ tend formellement vers la limite

$$C(\infty) = R C_0 R^{-1} (\Gamma(\Pi R C_0 R^{-1}))^{-1} . \tag{6-18}$$

On est ainsi conduit au problème d'élimination mentionné au début de cette section.

CONCLUSION

La théorie cinétique qu'on vient de présenter est loin d'avoir atteint une forme définitive. Elle souffre de deux défauts. D'une part, l'existence des opérateurs utilisés est mal établie. S'il semble possible, pour des potentiels raisonnables, de montrer que chacun de leurs noyaux intégraux existe, et, au moins pour t fini, peut être appliqué à des fonctions dans E , en revanche, la question de la convergence de développements comme (2-32) reste ouverte. A fortiori ne sait-on rien du comportement asymptotique de l'opérateur de corrélation. L'opinion semble même se répandre (voir par exemple [9]) que les noyaux intégraux de $C(t)$ d'ordre assez élevés, appliqués à des fonctions raisonnables (par exemple dans E) divergent à la limite $t \rightarrow \infty$.

D'autre part, on a introduit dans le choix des conditions initiales $C(0)$ ou $C(-\infty)$ un élément arbitraire dont il est difficile d'apprécier le rôle et l'importance. Il conviendrait de préciser la dépendance de l'opérateur (6-13) par rapport aux conditions initiales $U_1 = C(0)$. Si les corrélations décrites par C_1 ont une portée finie, [4,5,10], on peut espérer que cette dépendance est faible, au moins pour t assez grand.

Un important travail reste donc à accomplir pour établir la théorie sur des bases rigoureuses.

REFERENCES

- 1] N.N. Bogoliubov, dans: *Studies in Statistical Mechanics*, Vol. 1, North Holland, Amsterdam (1962).
- 2] G.E. Uhlenbeck et G.W. Ford, *Lectures in Statistical Mechanics*, AMS, Providence (1963).
- 3] H. Born et H.S. Green. Voir H.S. Green, *The Molecular Theory of Fluids*, Amsterdam (1952),
J. Kirkwood, *J. Chem. Phys.* 14, 180 (1946)
15, 72 (1947),
J. Yvon, *La théorie statistique des fluides*, Hermann, Paris (1935).
- 4] H.S. Green, *J. Chem. Phys.* 25, 836 (1956),
Physica 24, 393 (1958),
Lectures in Theoretical Physics, Boulder (1960), Interscience,
New York (1961) ;
H.S. Green et R. Piccirelli, *Phys. Rev.* 132, 1388 (1963),
- 5] E.G.D. Cohen, *Physica* 28, 1025, 1045, 1060 (1962),
J. Math. Phys. 4, 183 (1963).
- 6] D. Ruelle, *Lectures in Theoretical Physics*, Boulder (1963),
Univ. of Colorado Press, Boulder (1964).
- 7] R.J. Lewis, *J. Math. Phys.* 2, 222 (1961).
- 8] R. Zwanzig, *Lectures in Theoretical Physics*, Boulder (1960), Interscience,
New York (1961).
- 9] E.G.D. Cohen et J.R. Dorfman, *Phys. Let.* 16, 124 (1965).
- 10] F.C. Andrews, *J. Math. Phys.* 6, 1496 (1965).

TE/150

Acknowledgements

Dr. Minh-Binh Tran helped to put this article in form and is thanked for that. The text in the first section was elaborated with the invaluable help of Martine Le Berre and Paul Clavin. Both are warmly thanked.

Funding

NON.

Availability of data and materials

NON.

Declarations

Competing interests

The authors declare no competing interests.

Author contributions

All authors read and approved the final manuscript. YP wrote the introduction(sec.1) and the english summary (sec.2) . Section 3 is the original manuscript of JG, written in French.

Received: 13 March 2023 Accepted: 19 April 2023 Published online: 11 May 2023

References

1. Todorov, I.: From Euler's play with infinite series to the anomalous magnetic moment. IHES, January 2018 and references therein
2. Bogoliubov, N.N.: Problems of a dynamical theory in statistical physics. In: de Boer, J., Uhlenbeck, G.E. (eds.) *Studies in Statistical Mechanics*, vol. 1. North-Holland, Amsterdam (1962)
3. Balescu, R.: Irreversible processes in ionized gases. *Phys. Fluids* **3**, 52–63 (1960)
4. Pomeau, Y.: A new kinetic theory for a dense classical gas. *Phys. Lett.* **27A**, 601–602 (1968)
5. Cohen, E.G.D., Dorfman, J.R.: Generic long-range correlations in molecular fluids. *Phys. Lett. A* **16**, 124 (1965)
6. Balescu, R.: *Equilibrium and Non Equilibrium Statistical Mechanics*. Wiley, New York (1975)
7. Uhlenbeck, G.E., Ford, G.W.: *Lectures in Statistical Mechanics*. Am. Math. Soc., Providence (1963)
8. Green, H.S.: *The Molecular Theory of Fluids*. Amsterdam (1952)
9. Green, M.S.: *J. Chem. Phys.* **25**, p. 836 (1956), *Physica* **24**, p. 395 (1958) and *Lectures in theoretical physics*, Boulder (1960) Interscience, New York (1961)
10. Cohen, E.G.D.: *Physica* **28** p. 1025, 1045 and 1060 (1962); *J. Math. Phys.* **4** p. 183 (1963)
11. Ruelle, D.: *Lectures in Theoretical Physics*. Univ. of Colorado press, Boulder (1963), Univ. of Colorado Press, Boulder (1964)
12. Pomeau, Y., Résibois, P.: Time dependent correlation functions and mode-mode coupling theories. *Phys. Rep.* **19**, 63–139 (1975)
13. Zwanzig, R.: *Lectures in theoretical physics*, Boulder (1960) published by Interscience, New York (1961)
14. Brush, S.G.: *Kinetic Theory, Vol. 2 Irreversible Processes*. Pergamon, London (1966)

Publisher's Note

Springer Nature remains neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.

Submit your manuscript to a SpringerOpen[®] journal and benefit from:

- Convenient online submission
- Rigorous peer review
- Open access: articles freely available online
- High visibility within the field
- Retaining the copyright to your article

Submit your next manuscript at ► [springeropen.com](https://www.springeropen.com)
