Paru dans *Séminaire E.D.P., Ecole Polytechnique, exposé N. XXI, 1999-2000*

Résultats de convergence et de non-convergence de l'équation de Von-Neumann périodique vers l'équation de Boltzmann quantique.

François CASTELLA
CNRS et IRMAR - Université de Rennes 1 - Campus de Beaulieu
35042 Rennes Cedex - France.

La section 2 est pour partie en collaboration avec P. DEGOND (Université Toulouse III).

La section 3 est en collaboration avec A. PLAGNE (LIX - Ecole Polytechnique).

Ce document est la synthèse des références [Ca2], [Ca3] (voir aussi [CD] pour l'annonce d'un résultat plus faible) d'une part (résultats de convergence), et [CP1], [CP2] d'autre part (résultats de non-convergence).

1 Introduction

On s'intéresse ici à la dynamique quantique d'un électron dans une répartition périodique d'obstacles en dimension D d'espace, pour des dimensions $D \geq 3$. La taille de la période est mesurée par le grand paramètre L, et chaque cellule élementaire, de volume $\sim L^D$, contient un obstacle, qui occupe un volume ~ 1. On considère la limite $L \to \infty$. Afin d'obtenir une dynamique limite non-triviale, on est également amené à changer d'échelle en temps, et à observer l'électron sur des temps longs d'ordre T, $T \to \infty$. Plus précisément, l'échelle pertinente est dictée par le choix $T \sim L^D$. En effet, dans ces échelles, la densité d'obstacles, c'est-à-dire la proportion de volume occupée par les obstacles, est d'ordre $\sim 1/L^D$, de sorte que la probabilité que l'électron rencontre un obstacle sur des temps d'ordre $T \sim L^D$ se trouve être l'unité. Ce changement d'échelle est connu sous le nom de "limite faible densité", ou encore limite de Boltzmann-Grad. Cette situation est décrite par une équation de Von-Neumann,

$$\frac{i}{T}\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\rho}(t,x,y) = (-\Delta_x + \Delta_y)\tilde{\rho} + (\lambda V(x) - \lambda V(y))\tilde{\rho}\ , \tag{1.1}$$

où t est le temps, les variables d'espace x et y parcourent le Tore $(\mathbb{R}/2\pi L\mathbb{Z})^D$, et le potentiel $\lambda V(x) \in \mathbb{R}$ prend en compte l'interaction avec les obstacles, plus ou moins forte suivant la valeur du paramètre de couplage $\lambda \in \mathbb{R}$. Pour simplifier, la fonction V sera toujours supposée très régulière et de support compact fixe et nous renvoyons aux références ci-dessous pour des énoncés précis sur ce point. Egalement, l'inconnue $\tilde{\rho}(t,x,y)$ désigne la matrice densité de l'électron, qui décrit entièrement l'état quantique de l'électron à l'instant t.

C'est l'analogue de la fonction d'onde $\psi(t,x)$ dans l'équation de Schrödinger $i\partial_t\psi = (-\Delta_x + \lambda V)\psi$. En dernier lieu, on considère des états initiaux un peu particuliers dans ce contexte, puisque l'on supposera toujours qu'initialement le système est à l'équilibre pour le Hamiltonien non-perturbé $-\Delta_x$, i.e. que $\tilde{\rho}(0,x,y)$ est solution stationnaire de $i/T\ \partial_t\tilde{\rho} = (-\Delta_x + \Delta_y)\tilde{\rho}$. Typiquement, on considèrera la situation d'équilibre thermodynamique initial,

$$\tilde{\rho}(0,x,y) = \left(\exp(+\beta\Delta_x)\right)(x,y)\ , \tag{1.2}$$

où le terme de droite désigne le noyau intégral de l'opérateur $\exp(+\beta\Delta_x)$, et $\beta > 0$ est un paramètre arbitraire. On considère donc pour résumer l'influence en temps long et dans une limite faible densité de la perturbation λV pour des états initiaux qui sont des états d'équilibre de $-\Delta_x$.

Il est formellement attendu que, lorsque $L \to \infty$, ce type de modèle converge en un sens à préciser vers une équation de type Boltzmann linéaire, connue sous le nom d'équation de Boltzmann quantique. En particulier, on s'attend formellement à ce que le modèle (1.1), qui est réversible en temps, converge vers une équation de Boltzmann linéaire qui est irréversible en temps et possède une entropie. C'est bien sûr une des difficultés clé dans l'analyse mathématique de l'asymptotique $L \to \infty$ dans (1.1), et l'idée formelle qui sous-tend une telle convergence se trouve être la "convergence vers 0" de certaines "corrélations" dans ce système, dans un sens que nous laissons volontairement vague. Nous détaillons le sens de cet asymptotique ci-dessous.

Plus précisément, soit $\rho(t,n,p)$ $(n,\ p \in \mathbb{Z}^D)$ la transformée de Fourier discrète de $\tilde{\rho}$, définie comme,

$$\rho(t,n,p) := \int_{(\mathbb{R}/(2\pi L)\mathbb{Z})^D} \frac{\exp(in\cdot x/L)}{(2\pi L)^{D/2}}\tilde{\rho}(t,x,y)\frac{\exp(-ip\cdot y/L)}{(2\pi L)^{D/2}}dxdy\ . \tag{1.3}$$

On note alors $\rho_d(t,n) := \rho(t,n,n)$ la partie diagonale de ρ, et $\rho_{nd}(t,n,p) := \rho(t,n,p)\mathbf{1}(n \neq p)$ sa partie non-diagonale. Physiquement, ρ_d représente la probabilité, à l'instant t, de trouver l'électron dans le n-ième état propre $\exp(in\cdot x/L)/(2\pi L)^{D/2}$ du Hamiltonien non-perturbé $-\Delta_x$ sur le Tore, et ρ_{nd} représente la corrélation entre le nombre d'occupation des n-ièmes et p-ièmes états propres. Dans l'espace de Fourier, l'équation initiale devient,

$$\begin{aligned}&\frac{i}{T}\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,n,p) = \frac{n^2-p^2}{L^2}\rho \\ &+\frac{\lambda}{(2\pi L)^D}\sum_{k\in\mathbb{Z}^D}\widehat{V}(\frac{n-k}{L})\rho(t,k,p) - \widehat{V}(\frac{k-p}{L})\rho(t,n,k)\ ,\end{aligned} \tag{1.4}$$

où $\widehat{V}(\mathbf{N})$ désigne la transformée de Fourier usuelle du profil V supporté dans la cellule élémentaire $[-\pi L, +\pi L]^D$,

$$\widehat{V}(\mathbf{N}) = \int_{\mathbb{R}^D} V(x)\exp(-i\mathbf{N}\cdot x)dx = \int_{[-\pi L,+\pi L]^D} V(x)\exp(-i\mathbf{N}\cdot x)dx\ .$$

De plus, l'hypothèse de donnée initiale "à l'équilibre" mentionnée plus haut se formule quantitativement dans ces variables par,

$$\rho_d(0,n) \equiv \frac{1}{L^D}\rho_d^0(\frac{n}{L}) \ , \qquad \rho_{nd}(0,n,p) \equiv 0 \ , \tag{1.5}$$

où le profil $\rho_d^0(\mathbf{N})$ ($\mathbf{N} \in \mathbb{R}^D$) est supposé très régulier et décroissant, de sorte que la distribution $\sum_{n\in\mathbb{Z}^D} \rho_d(0,n)\delta(x-n/L)$ converge vers le profil $\rho_d^0(x)$ lorsque $L \to \infty$ (on vérifie aisément que le cas (1.2) est un cas particulier de (1.5)). Avec ces notations, on s'attend à ce que, dans la limite $L \to \infty$, l'influence de la perturbation λV entraîne uniquement des *transitions* entre les différents états propres $\exp(i\mathbf{N}\cdot x)$ ($\mathbf{N} \in \mathbb{R}^d$) du Hamiltonien non-perturbé $-\Delta_x$ sur tout l'espace $\mathbb{R}^D$. De plus, ces transitions sont formellement décrites par l'équation de Boltzmann linéaire,

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_d(t,\mathbf{N}) = 2\pi \int_{\mathbb{R}^D} \delta(\mathbf{N}^2 - \mathbf{K}^2)\sigma(\mathbf{N},\mathbf{K})[\rho_d(t,\mathbf{K}) - \rho_d(t,\mathbf{N})]d\mathbf{K} \ , \tag{1.6}$$

connue sous le nom d'équation de Boltzmann quantique. Ici, $\rho_d(t,\mathbf{N})$ désigne la limite de $\rho_d(t,n)$, elle est indexée par la variable continue $\mathbf{N} \in \mathbb{R}^D$ car, dans la limite $L \to \infty$, le spectre du Laplacien devient naturellement continu. La masse de Dirac $\delta(\mathbf{N}^2 - \mathbf{K}^2)$ indique également que seules des transitions entre états de même énergie peuvent avoir lieu. Enfin, le taux de transition $\sigma(\mathbf{N},\mathbf{K})$ représente la probabilité de transition entre un état $\mathbf{N}$ et un état $\mathbf{K}$. Il est attendu que ce taux soit donné par la série de Born [RS] attachée au potentiel λV. En particulier, σ peut être développé en série en λV, et le premier terme de ce développement doit être donné par la règle d'or de Fermi,

$$\sigma(\mathbf{N},\mathbf{K}) = \lambda^2|\widehat{V}(\mathbf{K}-\mathbf{N})|^2 + O(\lambda^3) \ . \tag{1.7}$$

Ce travail est dédié à l'étude rigoureuse de la convergence de (1.4)-(1.5) vers (1.6).

Nous considérons en vérité deux limites sensiblement différentes.

1- Dans le premier cas (article [Ca2]), (voir aussi [CD] pour un précédent travail dans le même esprit) nous adjoignons au système { électron + obstacles } un terme *phénoménologique* d'amortissement exponentiel, qui modélise de manière extrêmement simplifiée l'interaction, supposée faible, de ce système avec un bain extérieur de photons (voir [Bo], [NM], [SSL]). L'amortissement est mesuré par le petit paramètre $\alpha > 0$. On caractérise la limite obtenue en faisant successivement tendre $L \to \infty$ *puis* $\alpha \to 0$. Notons que ce type de couplage à un bain extérieur est très standard en physique statistique lorsque l'on souhaite exhiber l'émergence d'une dynamique limite irréversible pour le petit système couplé au bain [Sp2,3]. De manière plus quantitative, on cherche précisément à passer à la limite dans l'équation (1.4) modifiée de la manière suivante,

$$\begin{aligned}
&\frac{i}{T}\frac{\partial}{\partial t}\rho(t,n,p) = \frac{n^2-p^2}{L^2}\rho - i\alpha\rho_{nd}(t,n,p) \\
&+\frac{\lambda}{(2\pi L)^D}\sum_{k\in\mathbb{Z}^D} \widehat{V}(\frac{n-k}{L})\rho(t,k,p) - \widehat{V}(\frac{k-p}{L})\rho(t,n,k)\ ,
\end{aligned} \tag{1.8}$$

où la partie non-diagonale ρ_{nd} est donc rendue d'emblée exponentiellement décroissante. C'est précisément ce terme d'amortissement qui donne ici la "convergence vers 0 des corrélations" déjà mentionnée dans un sens volontairement vague plus haut. Nous mentionnons au passage que le terme additionnel $-i\alpha\rho_{nd}$ satisfait la propriété de Lindblad [Li], de sorte que la positivité de la matrice densité (en tant qu'opérateur) est préservée par cette évolution. De cette manière, on perturbe en particulier l'équation initiale (1.4) en une équation *irréversible* en temps. On montre que la dynamique limite $L\to\infty$ *suivie de* $\alpha\to 0$ est effectivement décrite par l'équation de Boltzman (1.6), avec une section efficace donnée au premier ordre par la règle d'or de Fermi (1.7), et même donnée à tous les ordres par la série de Born (Théorème 2.3). Comme nous l'indiquerons plus bas, notre résultat démontre en particulier la convergence d'une dynamique irréversible et non-Markovienne vers une dynamique irréversible et Markovienne (perte de mémoire - Théorème 2.2). Le lecteur intéressé trouvera des références plus complètes, une discussion approfondie du modèle, ainsi que les preuves des énoncés dans [Ca2] et [Ca3]. Nous mentionnons que les résultats énoncés ici améliorent une précédente annonce [CD].

2- Dans le second cas, en collaboration avec Alain PLAGNE (LIX - Ecole Polytechnique), nous cherchons à passer *directement* à la limite dans (1.4), sans s'appuyer sur le paramètre de régularisation α. Dans ce cas, on observe que les contributions liées au lieu résonnant $n^2=p^2$ dans (1.4) sont anormalement dominantes par rapport aux contributions non-résonnantes liées aux points n et p tels que $n^2\neq p^2$, et ce d'un facteur $L^\varepsilon \ln L$ ($\varepsilon>0$ arbitraire et même $\varepsilon\equiv 0$ en dimension $D\geq 5$). Dès lors, une caractérisation arithmétique précise de la répartition angulaire des points entiers tels que $n^2=p^2$ (Théorème 3.2) nous permet de calculer complètement la contribution résonnante limite (Théorème 3.1). On observe alors sur la valeur limite *explicite* de $\rho(t,n,p)$ que la dynamique limite suivie par cette fonction du temps est *réversible* en temps, car invariante par le changement de variable $t\mapsto -t$, $i\mapsto -i$. Il en va de même pour la partie diagonale $\rho_d(t,n)$. Le lecteur intéressé trouvera des énoncés et preuves plus précis dans [CP1,2]. Ce résultat montre que, dans le cas à vrai dire hautement non-générique d'une équation de Von-Neumann posée sur le Tore, on ne peut pas avoir convergence vers l'équation (1.6) formellement attendue: pour anticiper un peu sur les références données plus bas, la convergence vers une équation de Boltzmann nécessite de considérer une version "perturbée" de (1.4), que ce soit par l'introduction d'un paramètre d'amortissement α comme dans (1.8), ou par la considération d'une répartition aléatoire d'obstacles comme dans les références ci-dessous. Pour dire les choses de manière grossière mais plus intuitive, ce phénomène est lié à une répartition anormale des angles θ pour lesquels un électron qui suit une trajectoire semi-classique d'angle θ, rencontre un obstacle en temps fini dans le champ périodique d'obstacles où il évolue (certaines trajectoires pathologiques peuvent ne jamais rencontrer d'obstacle). Ce phénomène disparait bien entendu lorsque le champ d'obstacles est rendu "suffisamment aléatoire", ou bien lorsque la périodicité est compensée par le terme d'amortissement exponentiel. Nous souhaitons indiquer ici qu'un résultat semblable de non-convergence vers une équation de Boltzmann a déjà été démontré dans [BGW] dans un cadre de mécanique classique: dans cet article, les auteurs étudient la limite de Boltzmann-Grad en deux dimensions d'espace pour une particule classique lancée dans un champ périodique de sphères dures, et des effets semblables de mauvaise répartition des angles θ pour lesquels un obstacle est rencontré ont lieu. Ceux-ci sont liés de manière analogue aux propriétés arithmétiques de θ, et cette "anomalie" permet aux auteurs de montrer que la convergence vers l'équation de Boltzmann classique attendue ne peut avoir lieu dans ce cadre.

3- En résumé, sur le plan purement analytique, la différence qualitative et quantitative très importante dans les résultats obtenus lors de la double limite $L \to \infty$, $\alpha \to 0$ dans (1.8) d'une part, et lors de la limite directe (sans paramètre de régularisation) $L \to \infty$ dans (1.4) d'autre part, peut être expliquée synthétiquement de la manière suivante. Après quelques manipulations plus ou moins élémentaires, toute la difficulté analytique dans ces deux passages à la limite se trouve concentrée dans le problème de trouver l'asymptotique du terme typique,

$$S(L,\alpha) = \frac{1}{L^{2D}} \sum_{(n,p)\in\mathbb{Z}^{2D}} \int_0^{L^D t} \exp(i\frac{n^2-p^2}{L^2}s - \alpha s)ds \; \phi(\frac{n}{L},\frac{p}{L}) \;, \tag{1.9}$$

pour une fonction test régulière ϕ, d'une part dans la limite $L \to \infty$ suivie de $\alpha \to 0$, d'autre part dans la limite $\alpha \to 0$ suivie de $L \to \infty$. On voit d'emblée sur la formule (1.9) une compétition entre l'effet purement discret d'échantillonage de l'espace $\mathbb{R}^{2D}$ sur le réseau $\mathbb{Z}^{2D}/L$, qui tend à transformer la somme discrète ci dessus en intégrale $\int_{\mathbb{R}^{2D}} \cdots d\mathbf{n}\, d\mathbf{p}$, et l'effet purement continu de la convergence du terme $\int_0^{L^D t} \exp(i\frac{n^2-p^2}{L^2}s)ds$ vers $\int_0^{+\infty} \exp(i[\mathbf{n}^2 - \mathbf{p}^2]s)ds$, un objet qui n'a de sens qu'en tant que distribution en $\mathbf{n}$ et $\mathbf{p}$. Avec ce point de vue, on peut résumer notre analyse ainsi: dans la limite "avec paramètre de régularisation" $L \to \infty$ suivie de $\alpha \to 0$, l'amortissement α gomme les traces de l'échantillonnage discret, et on montre effectivement la limite,

$$\lim_{\alpha\to 0}\lim_{L\to\infty} S(L,\alpha) = \int_{\mathbb{R}^{2D}} \int_0^{+\infty} \exp(i[\mathbf{n}^2 - \mathbf{p}^2]s)\phi(\mathbf{n},\mathbf{p})ds\; d\mathbf{n}\; d\mathbf{p} \;. \tag{1.10}$$

Dans la limite "sans régularisation" $\alpha \to 0$ suivie de $L \to \infty$ à l'inverse, l'échantillonage discret "domine". En particulier, seules les résonnances $n^2 = p^2$ laissent une trace à la limite dans (1.9) (ce qui n'est pas le cas dans (1.10)). De plus, le terme $S(L,\alpha)$ doit être renormalisé dans ce cas. Plus précisément, on montre la convergence,

$$\lim_{L\to\infty}\lim_{\alpha\to 0} \frac{1}{L^{D-2}} S(L,\alpha) = \int_{\mathbb{R}^{2D}} \phi(\mathbf{n},\mathbf{p})d\mu(\mathbf{n},\mathbf{p}) \;, \tag{1.11}$$

pour une certaine mesure $d\mu$ explicite qui ne charge que les points $\mathbf{n}^2 = \mathbf{p}^2$, et dont la valeur exacte dépend de la répartition précise des points entiers n et p tels que $n^2 = p^2$: dans les notations utilisées dans section 3 ci-dessous, la valeur exacte de la mesure $d\mu$, comme la renormalisation par L^{D-2} dans (1.11) proviennent directement des formules purement arithmétiques (3.8) et (3.9) ci-dessous, et la mesure $d\mu$ dépend même très fortement du comportement de la série singulière $\mathfrak{S}$ définie dans (3.10).

Nous terminons cette longue introduction par des références bibliographiques plus complètes.

La convergence de modèles de type Von-Neumann linéaire $i\partial_t\tilde{\rho} = [-\Delta + \lambda V, \tilde{\rho}]$ vers des modèles de type Boltzmann Quantique a été introduite de manière formelle dans [Pa], puis dans [KL], [Ku], [VH1,2,3] (voir aussi [Ja]). Plus tard, la convergence rigoureuse de ces modèles a été rigoureusement démontrée, entre autres, dans [Sp1] (voir aussi [Sp2,3]), [La], [HLW], [EY] lorsque le potentiel perturbateur V est aléatoire, et l'on dispose dans ce cadre de résultats en espérance. En particulier, dans la célèbre "limite de Van-Hove" (ou: Weak-coupling limit) $i\varepsilon^2\partial_t\tilde{\rho} = [-\Delta + \varepsilon V, \tilde{\rho}]$ ($\varepsilon \to 0$), les auteurs cités ci-dessus montrent la convergence de modèles réversibles et non-Markoviens vers des équations de type Boltzmann irréversibles et Markoviennes, et l'équation de Boltzmann limite n'est pas nécessairement homogène. Citons également [KPR] pour des résultats reliés. Sur le plan technique, la "prise d'espérance" dans ces travaux fournit la convergence souhaitée vers 0 des "corrélations", de manière analogue à l'effet de l'amortissement exponentiel introduit dans (1.8).

Nous souhaitons également citer [Ni1,2] pour des résultats décrivant la convergence de certains modèles de Von-Neumann vers des équations de type Boltzmann réversibles, dans une limite semi-classique.

Au vu de ces résultats, il est naturel de s'intéresser comme nous le faisons ici à une situation où le potentiel V est déterministe et périodique. Dans un précédent article, notons que l'auteur [Ca1] montre un résultat négatif de convergence dans ce cadre : si la taille de la période L est fixée égale à un, l'équation (réversible) de Von-Neumann $i\varepsilon\partial_t\tilde{\rho} = [-\Delta + \varepsilon V, \tilde{\rho}]$ converge vers une équation de type Boltzmann linéaire qui n'est pas l'équation prévue par la physique (1.6), car elle demeure réversible et non-Markovienne.

Nous passons maintenant à une description plus précise des deux résultats mentionnés dans cette introduction.

2 Un résultat de convergence [Ca2], [Ca3]

Dans le travail [Ca2], nous passons à la limite $L \to \infty$ puis $\alpha \to 0$ dans l'équation (1.8) avec donnée initiale (1.5). Nous décrivons les principales étapes du raisonnement.

Premier point: une équation fermée sur ρ_d avant passage à la limite.

A la suite des calculs explicites menés dans [Ca1] (voir [Zw] pour un résultat abstrait dans cette direction), nous montrons pour L et α donnés, que la partie diagonale ρ_d satisfait l'équation de Boltzmann "à mémoire" suivante,

Théorème 2.1 *Soient $\rho^{L,\alpha}(t,n,p)$ la solution (unique) du système (1.8) avec donnée initiale (1.5). Alors, pour tout $t \geq 0$, la partie diagonale $\rho_d^{L,\alpha}(t,n)$ satisfait,*

$$\partial_t \rho_d^{L,\alpha}(t,n) = \sum_{l=1}^{+\infty} \lambda^{l+1} \, (Q_l^{L,\alpha} \rho_d^{L,\alpha})(t,n) \, , \tag{2.1}$$

et pour chaque valeur de $l \in \mathbb{N}$, l'opérateur de collision linéaire $Q_l^{L,\alpha}$ est donné par,

$$\begin{aligned}
(Q_l^{L,\alpha} \rho_d^{L,\alpha})(t,n) &= (2\pi L)^{-Dl} \, (-2\mathcal{R}) \sum_{\varepsilon_1 ,\cdots, \varepsilon_l} \; \sum_{k_1 ,\cdots, k_l} \int_{u_1,\cdots,u_l} (-1)^{\tilde{\varepsilon}_1 + \cdots + \tilde{\varepsilon}_l} \; \times \\
&\times \exp\big(i \, \frac{(n+\varepsilon_1 k_1)^2 - (n - \tilde{\varepsilon}_1 k_1)^2}{L^2} \, u_1 - \alpha u_1\big) \times \cdots \times \\
&\times \exp\big(i \, \frac{(n+\varepsilon_1 k_1 + \cdots + \varepsilon_l k_l)^2 - (n - \tilde{\varepsilon}_1 k_1 - \cdots - \varepsilon_l k_l)^2}{L^2} \, u_l - \alpha u_l\big) \; \times \\
&\times [i\widehat{V}(\frac{k_1}{L})] \; [i\widehat{V}(\frac{k_2}{L})] \cdots [i\widehat{V}(\frac{k_l}{L})] \; \Big[i\widehat{V}^*(\frac{k_1 + k_2 + \cdots k_l}{L}) \Big] \times \\
&\times \rho_d^{L,\alpha}(t - \; (2\pi L)^{-D}(u_1 + u_2 + \cdots + u_l), n + \varepsilon_1 k_1 + \varepsilon_2 k_2 + \cdots + \varepsilon_l k_l) \, .
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Dans (2.2), les sommes $\sum_{\varepsilon_1 ,\cdots, \varepsilon_l}$, $\sum_{k_1 ,\cdots, k_l}$ portent sur les variables,

$$\begin{array}{l}
(\varepsilon_1 \, , \, \varepsilon_2 \, , \, \cdots \, , \, \varepsilon_l \,) \; \in \{0,1\}^l \, , \quad \text{avec: } \; \forall \, j \, , \; \tilde{\varepsilon}_j = (1 - \varepsilon_j) \, , \\
(k_1 \, , \, k_2 \, , \, \cdots \, , \, k_l) \; \in (\mathbb{Z}^D)^l \, , \;\; k_1 \neq 0 \, , \;\; k_1 + k_2 \neq 0 \, , \\
\cdots \, , \;\; k_1 + k_2 + \cdots k_l \neq 0 \, ,
\end{array} \tag{2.3}$$

et les intégrales $\displaystyle\int_{u_1,\cdots,u_l}$ portent sur les variables,

$$\left\{ \begin{array}{l}
0 \leq u_1 \leq (2\pi L)^D t \, , \\
0 \leq u_2 \leq (2\pi L)^D t - u_1 \, , \\
\cdots \, , \\
0 \leq u_l \leq (2\pi L)^D t - u_1 - \cdots - u_{l-1} \, .
\end{array} \right. \tag{2.4}$$

En particulier, pour $l = 1$, l'opérateur $Q_1^{L,\alpha}$ vaut,

$$\begin{aligned}
(Q_1^{L,\alpha} \rho_d)(t,n) &= 2 \, (2\pi L)^{-D} \int_{u=0}^{(2\pi L)^D t} \sum_{k \neq 0} \cos\big(\frac{n^2 - k^2}{L^2} u\big) \exp(-\alpha u) \; \times \\
&\times |\widehat{V}|^2 (\frac{n-k}{L}) \; [\rho_d(t - (2\pi L)^{-D} u, k) - \rho_d(t - (2\pi L)^{-D} u, n)] \; du \, .
\end{aligned} \tag{2.5}$$

Remarque importante
On voit sur (2.2) que, avant tout passage à la limite, ρ_d satisfait naturellement

une équation de Boltzmann avec mémoire en temps. Après quelques manipulations élémentaires, toute la difficulté analytique dans cette partie comme dans la suivante consiste alors à étudier la convergence $L \to \infty$ de quantités typiques de la forme (voir aussi l'introduction),

$$\frac{1}{L^{2D}} \sum_{(n,p)\in\mathbb{Z}^D} \int_0^{L^D t} \exp(i\frac{n^2-p^2}{L^2}s)\exp(-\alpha s)\phi(t-\frac{s}{L^D},\frac{n}{L},\frac{p}{L})ds \ , \qquad (2.6)$$

pour des fonctions test régulières ϕ. Pour cette partie, on peut essentiellement résumer la démarche proposée de la manière suivante: lorsque $\alpha > 0$, la convergence $L \to \infty$ dans (2.6) est simplement liée à la convergence des sommes de Riemann vers leurs intégrales associées, et on obtient le terme,

$$\int_{(\mathbf{n},\mathbf{p})\in\mathbb{R}^D} \int_0^{+\infty} \exp(i[\mathbf{n}^2-\mathbf{p}^2]s)\exp(-\alpha s)\phi(t,\mathbf{n},\mathbf{p})dsd\mathbf{n}d\mathbf{p} \ , \qquad (2.7)$$

la seule difficulté étant d'obtenir suffisamment d'estimées apriori sur $\rho_d^{L,\alpha}$ et surtout ses dérivées en temps pour justifier le passage à la limite, et en particulier obtenir effectivement la localisation souhaitée du terme $t - s/L^D$ vers t. Ensuite, lorsque $\alpha \to 0$, on a la convergence vers,

$$\int_{(\mathbf{n},\mathbf{p})\in\mathbb{R}^D} \int_0^{+\infty} \exp(i[\mathbf{n}^2-\mathbf{p}^2]s)\phi(t,\mathbf{n},\mathbf{p})dsd\mathbf{n}d\mathbf{p} \ , \qquad (2.8)$$

l'intégrale $\int_0^{+\infty}\exp(i[\mathbf{n}^2-\mathbf{p}^2]s)ds$ ayant un sens en tant qu'intégrale oscillante. Il se trouve que les termes de collision Q_l pour les grandes valeurs de l donnent lieu à des produits de l telles intégrales oscillantes, et la véritable difficulté (voir le Lemme 2.1 ci-dessous) se réduit à contrôler la taille de la singularité ainsi créée en fonction de l. C'est le sens de l'estimation (2.16) ci-dessous. Ce résumé rapide est rendu plus précis dans les points qui suivent.

Deuxième point: Limite en L et perte de mémoire. Dans la limite $L \to \infty$, l'équation de type Boltzmann à mémoire (2.1)-(2.2) converge vers une équation sans mémoire (ou: Markovienne), comme le décrit le théorème suivant,

Théorème 2.2 *Soit $\rho_d^{L,\alpha}(t,n)$ la solution de (2.1)-(2.2). On définit la distribution $f^{L,\alpha}$, indexée par L et α,*

$$f^{L,\alpha}(t,\mathbf{n}) := \sum_{k\in\mathbb{Z}^D} \rho_d(t,k)\ \delta(\mathbf{n}-\frac{k}{L}) \ . \qquad (2.9)$$

Supposons de plus λ suffisamment petit, indépendamment de L et α. Alors, lorsque $L \to \infty$, la distribution $f^{L,\alpha}(t,\mathbf{n})$ converge pour une topologie de type $C^0(\mathbb{R}_t, \mathcal{S}'_{\mathbf{n}} - w*)$ ($\mathcal{S}$ désigne la classe de Schwartz) vers $f^\alpha(t,\mathbf{n})$ solution de,

$$\partial_t f^\alpha(t,\mathbf{n}) = \sum_{l=1}^{+\infty} \lambda^{l+1}\ (Q_l^\alpha f^\alpha)(t,\mathbf{n}) \ , \quad f^\alpha(t=0,\mathbf{n}) = (2\pi)^{-D}\rho_d^0(\mathbf{n}) \ , \quad (2.10)$$

où les opérateurs de collision Q_l^α sont donnés par,

$$
\begin{aligned}
&(Q_l^\alpha f^\alpha)(t,\mathbf{n}) = (2\pi)^{-Dl}(-2\mathcal{R}) \sum_{\varepsilon_1,\cdots,\varepsilon_l} \int_{\mathbf{k}_1,\cdots,\mathbf{k}_l} \int_{u_1=0}^{+\infty} \int_{u_2=0}^{+\infty} \cdots \int_{u_l=0}^{+\infty} \\
&(-1)^{\tilde{\varepsilon}_1+\cdots+\tilde{\varepsilon}_l} \exp\left(i[(\mathbf{n}+\varepsilon_1\mathbf{k}_1)^2 - (\mathbf{n}-\tilde{\varepsilon}_1\mathbf{k}_1)^2]u_1 - \alpha u_1\right) \times \cdots \times \\
&\times \exp\left(i[(\mathbf{n}+\varepsilon_1\mathbf{k}_1+\cdots+\varepsilon_l\mathbf{k}_l)^2 - (\mathbf{n}-\tilde{\varepsilon}_1\mathbf{k}_1-\cdots\tilde{\varepsilon}_l\mathbf{k}_l)^2]u_l - \alpha u_l\right) \times \\
&\times [i\widehat{V}(\mathbf{k}_1)]\cdots[i\widehat{V}(\mathbf{k}_l)][i\widehat{V}^*(\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_l)] \\
&\times f^\alpha(t,\mathbf{n}+\varepsilon_1\mathbf{k}_1+\cdots+\varepsilon_l\mathbf{k}_l)\ .
\end{aligned}
\tag{2.11}
$$

Ici, les variables $\varepsilon_1, \cdots, \varepsilon_l$ sont comme dans (2.3), et les variables $\mathbf{k}_1, \cdots,$ $\mathbf{k}_l$ parcourent $\mathbb{R}^D$ tout entier. Egalement, le premier opérateur de collision Q_1^α dans (2.11) vaut,

$$
\begin{aligned}
&(Q_1^\alpha f^\alpha)(t,\mathbf{n}) = 2\lambda^2 \int_{\mathbf{k}\in\mathbb{R}^D} \int_{u=0}^{+\infty} e^{-\alpha u} \cos\left([\mathbf{n}^2-\mathbf{k}^2]u\right) \\
&|\widehat{V}(\mathbf{n}-\mathbf{k})|^2\ [f^\alpha(t,\mathbf{k}) - f^\alpha(t,\mathbf{n})] \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D}\ .
\end{aligned}
\tag{2.12}
$$

Troisième point: limite en α et obtention de l'équation de Boltzmann Quantique. Dans la limite $\alpha \to 0$, nous obtenons la convergence vers l'équation de Boltzmann souhaitée, comme le décrit le Théorème suivant,

Théorème 2.3 *(Limite $\alpha \to 0$).*
Soit $f^\alpha(t,\mathbf{n})$ la solution de (2.10)-(2.11). Supposons λ suffisamment petit, indépendamment de α. Alors, lorsque α tend vers 0, $f^\alpha(t,\mathbf{n})$ converge pour une topologie de type $C^0(\mathbb{R}_t, \mathcal{S}'_{\mathbf{n}} - w*)$ vers $f(t,\mathbf{n})$ solution de l'équation de Boltzmann Quantique suivante,

$$
\partial_t f(t,\mathbf{n}) = \sum_{l=1}^{+\infty} \lambda^{l+1}\ (Q_l f)(t,\mathbf{n})\ , \quad f(t=0,n) = (2\pi)^{-D} \rho_d^0(n)\ , \tag{2.13}
$$

où les opérateurs de collision Q_l sont donnés par,

$$
\begin{aligned}
&(Q_l f)(t,\mathbf{n}) = (2\pi)^{-Dl}\ (-2\mathcal{R}) \sum_{\varepsilon_1,\cdots,\varepsilon_l} \int_{\mathbf{k}_1,\cdots,\mathbf{k}_l} \int_{u_1=0}^{+\infty} \cdots \int_{u_l=0}^{+\infty} (-1)^{\tilde{\varepsilon}_1+\cdots+\tilde{\varepsilon}_l} \times \\
&\times \exp\left(i[(\mathbf{n}+\varepsilon_1\mathbf{k}_1)^2 - (\mathbf{n}-\tilde{\varepsilon}_1\mathbf{k}_1)^2]u_1\right) \times \cdots \times \\
&\times \exp\left(i[(\mathbf{n}+\varepsilon_1\mathbf{k}_1+\cdots+\varepsilon_l\mathbf{k}_l)^2 - (n-\tilde{\varepsilon}_1\mathbf{k}_1-\cdots\tilde{\varepsilon}_l\mathbf{k}_l)^2]u_l\right) \times \\
&\times [i\widehat{V}(\mathbf{k}_1)]\cdots[i\widehat{V}(\mathbf{k}_l)] \times [i\widehat{V}^*(\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_l)]\times \\
&\times f(t,\mathbf{n}+\varepsilon_1\mathbf{k}_1+\cdots+\varepsilon_l\mathbf{k}_l)\ .
\end{aligned}
\tag{2.14}
$$

Par ailleurs, les variables $\varepsilon_1, \cdots, \varepsilon_l$, et $\mathbf{k}_1, \cdots, \mathbf{k}_l$ sont comme dans le Théorème 2.1. Bien sûr, le premier opérateur de collision dans (2.14) est donné par,

$$
(Q_1 f)(t,\mathbf{n}) = 2\pi\lambda^2 \int_{\mathbf{k}} \delta(\mathbf{n}^2-\mathbf{k}^2)\ |\widehat{V}(\mathbf{n}-\mathbf{k})|^2 [f(t,\mathbf{k}) - f(t,\mathbf{n})]\ \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^D}\ , \tag{2.15}
$$

de sorte que la règle d'or de Fermi (1.7) est satisfaite.

Remarque
On montre dans [Ca3] que l'équation (2.13)-(2.14) peut se mettre sous la forme (1.6), avec une section efficace σ donnée par la série de Born. Ce fait est loin d'être évident sous la forme donnée dans (2.14), voir [Ca3].

Quatrième point. Le Lemme clé de notre travail, qui permet en particulier de donner un sens aux intégrales oscillantes dans (2.14), est donné par le,

Lemme 2.1 *(Intégrales oscillantes avec phases quadratiques).*
Soit $\psi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^D)$. Alors, pour tout choix de $\varepsilon_1, \cdots, \varepsilon_l$ comme dans le Théorème 2.1, les intégrales oscillantes suivantes sont bien définies,

$$
\begin{aligned}
&I_l(\psi) := \\
&\int_{u_1=0}^{+\infty} \cdots \int_{u_l=0}^{+\infty} \int_{(\mathbf{n},\mathbf{k}_1,\cdots,\mathbf{k}_l)\in\mathbb{R}^{D(l+1)}} \exp\left(i\left[(\mathbf{n}+\varepsilon_1\mathbf{k}_1)^2 - (\mathbf{n}-\tilde{\varepsilon}_1\mathbf{k}_1)^2\right] u_1\right) \times \\
&\quad \times \cdots \times \exp\left(i\left[(\mathbf{n}+\varepsilon_1\mathbf{k}_1+\cdots+\varepsilon_l\mathbf{k}_l)^2 - (\mathbf{n}-\tilde{\varepsilon}_1\mathbf{k}_1-\cdots-\varepsilon_l\mathbf{k}_l)^2\right]u_l\right) \times \\
&\widehat{V}(\mathbf{k}_1)\cdots\widehat{V}(\mathbf{k}_l)\widehat{V}^*(\mathbf{k}_1+\cdots+\mathbf{k}_l)\psi(\mathbf{n}+\varepsilon_1\mathbf{k}_1+\cdots+\varepsilon_l\mathbf{k}_l) .
\end{aligned}
$$

De plus, ces intégrales convergent absolument dans les variables $u_1, \cdots, u_l$, et l'on a la borne géométrique,

$$
|I_l(\psi)| \leq C_0^l \|\widehat{V}\|_{W^{D+1,1}}^{l+1} \, \|\psi\|_{W^{D+1,\infty}} , \tag{2.16}
$$

pour une constante universelle C_0.

Remarque
La borne (2.16) est cruciale à deux égards. D'abord, on observe que le terme de droite nécessite un nombre fixe (indépendant de l) de dérivées de $\widehat{V}$ et ψ, alors même que la singularité créée par les intégrales oscillantes semble croître avec l. De plus, la borne (2.16) est géométrique en l. Ces deux points sont importants dans la mesure où l'estimée naturelle du terme de gauche serait plutôt du type $\leq C^l l^l$.

Nous ajoutons également l'observation suivante. Quitte à faire quelques changement de variables élémentaires, on peut voir ce Lemme comme la définition de la distribution,

$$
(\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}_1^2 + i0)^{-1}(\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}_2^2 + i0)^{-1} \cdots (\mathbf{n}^2 - \mathbf{k}_l^2 + i0)^{-1} . \tag{2.17}
$$

La définition d'une telle distribution n'est pas une conséquence des Théorèmes généraux sur la composition et le produit des distributions de fronts d'onde donnés parce que la singularité à l'origine $\mathbf{n} = \mathbf{k}_1 = \cdots = \mathbf{k}_l = 0$ est trop forte. Le Lemme ci-dessus, qui permet de définir quand même (2.17), exploite bien sûr de manière cruciale le caractère explicitement quadratique des phases. A cet égard, il est important de noter la seule présence du terme $+i0$ dans (2.17): le Lemme est faux ci un de ces termes est remplacé par $-i0$.

3 Un résultat de non-convergence [CP1], [CP2] - en collaboration avec A. Plagne (LIX - Ecole Polytechnique)

Comme annoncé dans l'introduction, on s'intéresse maintenant à l'étude directe de la limite $L \to \infty$ dans (1.4), sans faire usage de la régularisation par α. Comme on l'indique, la limite $L \to \infty$ est quantitativement et qualitativement très différente de (2.13)-(2.14).

Premier point: Le régime précis. Dans cette section, nous étudions en fait un régime un peu différent du régime faible densité décrit dans l'introduction et étudié dans la précédente section. En effet, nous posons,

$$\mathcal{T} = TL^{-2} \ , \ \Lambda = \lambda \mathcal{T} \ . \tag{3.1}$$

Avec ces notations, (1.4) devient,

$$\partial_t \rho(t,n,p) = -i\mathcal{T}[n^2 - p^2]\rho(t,n,p) - \tag{3.2}$$
$$-i\frac{\Lambda}{L^{d-2}} \sum_k \{\widehat{V}(\frac{n-k}{L})\rho(t,k,p) - \widehat{V}(\frac{k-p}{L})\rho(t,n,k)\} \ ,$$

et la donnée initiale est inchangée. Le régime faible densité correspond dans ces variables à $\mathcal{T} \sim L^{D-2}$. On s'intéresse ici au cas plus général où,

$$\mathcal{T} \to \infty \ , \ L \to \infty \ , \ \frac{\mathcal{T}}{L^\varepsilon \ln L} \to \infty \ , \tag{3.3}$$

avec la convention que $\varepsilon > 0$ est arbitrairement petit et peut être pris égal à zéro en dimension $D \geq 5$. De plus, on se place dans un régime où,

$$\Lambda \sim 1 \ . \tag{3.4}$$

Nous commentons ici la significationde ce régime. Tout d'abord, la condition (3.3) inclut à l'évidence le régime faible densité lorsque $D \geq 3$, ce que nous supposons toujours. La condition exacte $\mathcal{T}/L^\varepsilon \ln L \to \infty$ est technique et provient (entre autres) du fait que $\sum_{j=1}^{L} 1/j \sim \ln L$. D'autre part, la condition (3.4) est une condition du type "couplage faible", elle signifie dans les variables de départ que $\lambda \sim 1/(TL^{-2})$, ce qui entraîne, au vu de (3.3), que $\lambda \to 0$ au moins comme $1/L^\varepsilon \ln L$. Ce comportement est naturel dans le présent contexte, bien qu'il ne coïncide pas avec ce que l'on nomme "régime faible densité" où λ peut être fixé d'ordre 1. Finalement, la condition (3.3) donne dans les variables originales,

$$T >> L^2 \ .$$

Pour cette raison, le régime (3.3) correspond à un cas où l'échelle de temps T croît plus vite que L^2, de sorte que les exponentielles complexes $\exp(iT[n^2 - p^2]/L^2) = \exp(i\mathcal{T}[n^2 - p^2])$ (n, $p \in \mathbb{Z}^d$) qui interviennent de manière récurrente amplifient les résonnances $n^2 = p^2$. En d'autres termes, ce régime amplifie l'effet de "discrétisation" du spectre du Laplacien contenu dans le paramètre de troncature L. A cet égard, le présent travail répond à une question posée dans [Co] dans un cadre physique, et montre que la discrétisation induit des effets qualitatifs et quantitatifs tout à fait non-négligeables.

Deuxième point: les résultats.
Nos résultats sont les suivants ([CP2]),

Théorème 3.1 *(i)- Soit $\rho(t,n,p)$ la solution de (3.2) avec donnée initiale (1.5). On définit (dans la représentation dite "d'interaction") la distribution $\rho_I(t,\mathbf{n},\mathbf{p})$ par,*

$$\rho_I(t,\mathbf{n},\mathbf{p}) := \sum_{(n,p)\in\mathbb{Z}^{2d}} \exp(i\mathcal{T}[n^2-p^2])\rho(t,n,p)\delta(\mathbf{n}-\frac{n}{L})\delta(\mathbf{p}-\frac{p}{L})\ . \qquad (3.5)$$

On se place dans le régime (3.3), (3.4). On suppose aussi que la dimension de travail satisfait,

$$D \geq 5\ . \qquad (3.6)$$

Alors, la distribution $\rho_I(t,\mathbf{n},\mathbf{p})$ est analytique en Λ, et chaque terme du développement en série en Λ converge faiblement vers une distribution concentrée sur la sphère d'énergie $\{\mathbf{n}^2=\mathbf{p}^2\}$ que l'on peut explicitement calculer. La série limite en Λ ainsi obtenue définit une distribution $\rho_I^\infty(t,\mathbf{n},\mathbf{p})$ qui est analytique en Λ. De plus, l'évolution en temps de $\rho_I^\infty(t,\mathbf{n},\mathbf{p})$ est réversible*, dans le sens où elle est invariante par le changement $t\mapsto -t$, $i\mapsto -i$.*

Remarques
1- Par souci d'exactitude, le Théorème 3.1 est écrit pour des dimensions $D\geq 5$. Le cas des dimensions 3 et 4 est en cours. Egalement, nous ne donnons pas l'expression explicite de ρ_I^∞, qui ne présente pas d'intérêt particulier.
2- Un énoncé analoge à celui du Théorème 3.1 a lieu pour la partie diagonale $\rho_d(t,n)=\rho(t,n,n)$.
3- Nous souhaitons souligner ici que la convergence mentionnée dans le Théorème 3.1 est relativement faible, dans la mesure où ce n'est qu'une convergence terme par terme de certaines séries en Λ. Nous ne sommes pas en mesure de dégager l'uniformité nécessaire pour passer à un résultat de convergence des séries elles-mêmes.

Comme nous en esquissons la preuve dans le troisième point ci-dessous, Le Théorème 3.1 est une conséquence du Théorème suivant,

Théorème 3.2 *(i)- Soit $\phi(\mathbf{n},\mathbf{k}_1,\cdots,\mathbf{k}_N)$ une fonction test régulière et décroissante définie sur $\mathbb{R}^{(N+1)D}$, où $D\geq 5$. On définit la "somme de Riemann avec contrainte quadratique",*

$$I_N := \frac{1}{L^{D+N(D-2)}} \sum_{n^2=k_1^2=\cdots=k_N^2} \phi(\frac{n}{L},\frac{k_1}{L},\cdots,\frac{k_N}{L})\ . \qquad (3.7)$$

Alors, lorsque $L\to\infty$, I_N converge vers une limite explicitement calculable, dont nous ne donnons pas l'expression ici.

(ii)- Le point (i) est une conséquence du Théorème suivant, démontré dans [CP1]: pour tout domaine $\Omega \subset \mathbb{S}^{D-1}$, mesurable par rapport à la mesure de surface euclidienne $d\sigma$, et pour toute dimension $D \geq 5$, l'asymptotique suivante a lieu,

$$\frac{\#\{n \in \mathbb{Z}^D \textit{ tels que } n^2 = L^2, \textit{ et } n/L \in \Omega\}}{\#\{n \in \mathbb{Z}^D \textit{ tels que } n^2 = L^2\}} \sim_{L\to\infty} \frac{d\sigma(\Omega)}{|\mathbb{S}^{D-1}|}\ , \tag{3.8}$$

où, comme il est connu,

$$\#\{n \in \mathbb{Z}^D \quad \textit{tels que} \quad n^2 = L^2\} \sim_{L\to\infty} \frac{\Gamma(1/2)^D}{\Gamma(D/2)}\, \mathfrak{S}(L^2)\, L^{D-2}\ , \tag{3.9}$$

et $\mathfrak{S}(L^2)$ est la "série singulière", définie comme,

$$\mathfrak{S}(L^2) := \sum_{q\geq 1} \frac{1}{q^D} \sum_{\substack{a=1\\ a\wedge q=1}}^{q} \Big(\sum_{m=1}^{q} \exp(2i\pi \frac{am^2}{q})\Big)^D \exp(-2i\pi \frac{aL^2}{q})\ . \tag{3.10}$$

Remarques

1- Il est bien connu que la série $\sum_q \cdots$ (3.10) qui définit $\mathfrak{S}(L^2)$ a un terme général borné par $1/q^{\frac{D}{2}-1}$. C'est la raison pour laquelle la contrainte $D \geq 5$ apparaît naturellement. Néanmoins, le point (ii) admet une reformulation simple dans les cas $D = 3$ ou 4 [CP1] et l'extension du point (i) à ces dimensions est en cours.

2- Le résultat (3.9) est bien connu et donne la répartition radiale des carrés de vecteurs entiers. Le résultat (3.8) est plus délicat et fournit également la répartition angulaire des vecteurs entiers de norme donnée.

Troisième point: méthode de preuve

Comme mentionné dans la section précédente, et au vu du Théorème 2.1 qui se récrit aisément lorsque $\alpha \equiv 0$ et dans le régime (3.3)-(3.4), on est naturellement amené a étudier la convergence de termes dont la forme typique est, disons,

$$\frac{1}{L^{D+(D-2)}} \sum_{(n,p)\in\mathbb{Z}^{2D}} \int_{s=0}^{t} \exp(i\mathcal{T}[n^2 - p^2]s)\Phi(\frac{n}{L}, \frac{p}{L})\, ds\ , \tag{3.11}$$

pour une fonction test $\Phi(\mathbf{n}, \mathbf{p})$ régulière et à support compact. Le point important est que cette "somme de Riemann" est a priori incorrectement normalisée en L (le préfacteur attendu est $1/L^{2D}$ au lieu de $1/L^{D+(D-2)}$). Néanmoins, nous prouvons ci-dessous la convergence du terme (3.11), montrant ainsi que la normalisation $1/L^{D+(D-2)}$ est la bonne.

Au vu de (3.11), il est naturel de distinguer la contribution non-résonnante, pour laquelle $n^2 \neq p^2$, et la contribution résonnante pour laquelle $n^2 = p^2$.

Le terme non-résonnant

On montre la borne,

$$I := \Big|\frac{1}{L^{D+(D-2)}} \sum_{n^2\neq p^2} \int_{s=0}^{t} \exp(i\mathcal{T}[n^2 - p^2]s)\Phi(\frac{n}{L}, \frac{p}{L})\, ds\,\Big| \leq C\frac{L^{\varepsilon}\ln L}{\mathcal{T}}\ , \tag{3.12}$$

pour une constante C qui dépend de Φ et de ε, et $\varepsilon > 0$ est arbitraire et peut être pris égal à zéro en dimension $D \geq 5$. En effet, en décomposant la somme $\sum_{n^2 \neq p^2}$ suivant les valeurs de $\omega := n^2 - p^2 \in \mathbb{Z}^*$, on obtient facilement,

$$I = \frac{1}{L^{D+(D-2)}} \sum_{\omega \in \mathbb{Z}^*} \Big| \int_{s=0}^{t} \exp(i\mathcal{T}\omega s) \sum_{n^2-p^2=\omega} \Phi(\frac{n}{L}, \frac{p}{L})\, ds \Big| ,$$

et donc, après calcul explicite de l'intégrale,

$$I \leq \frac{1}{\mathcal{T}\ L^{D+(D-2)}} \sum_{\omega \in \mathbb{Z}^*} \frac{1}{|\omega|} \sum_{n^2-p^2=\omega} |\Phi|(\frac{n}{L}, \frac{p}{L}) .$$

Maintenant, on utilise que Φ a un support compact, de sorte que la somme ci-dessus est restreinte à (disons) $|\omega|$, $n^2 \leq L^2$. On obtient,

$$I \leq \frac{1}{\mathcal{T} L^{D+(D-2)}} \sum_{1 \leq |\omega| \leq L^2} \frac{1}{|\omega|} \#\{(n,p) \in \mathbb{Z}^d \text{ t.q. } n^2 \leq L^2, p^2 = n^2 - \omega\}. \tag{3.13}$$

On utilise alors le résultat fondamental,

$$\#\{p^2 = n^2 - \omega\} \leq c_\varepsilon (n^2 - \omega)^{\frac{D}{2}-1+\varepsilon} , \tag{3.14}$$

pour tout $\varepsilon > 0$, et pour toute dimension $D \geq 3$, et l'on peut prendre $\varepsilon = 0$ en dimension $D \geq 5$. D'où, au vu de $|\omega|$, $n^2 \leq L^2$, on obtient,

$$\#\{p^2 = n^2 - \omega\} \leq C L^{D-2+\varepsilon} ,$$

la puissance L^{D-2} étant la raison pour la normalisation en L utilisée dans (3.11). Ceci donne,

$$\begin{aligned} I &\leq \frac{C}{\mathcal{T}\ L^{D+(D-2)}} \sum_{1 \leq |\omega| \leq L^2} \frac{1}{|\omega|} \times L^D \times L^{D-2+\varepsilon} \\ &\leq C \frac{L^\varepsilon \ln L}{\mathcal{T}} \to 0 , \end{aligned}$$

et (3.12) est démontrée. Notons que le facteur $\ln L$ dans (3.12) est relié à la divergence logarithmique de la série harmonique. Notons aussi que nous utilisons fortement le fait que la différence $n^2 - p^2$ appartient à $\mathbb{Z}^*$, de sorte que nous n'avons pas de problème de "petits diviseurs" ($|\omega|$ est ≥ 1 dès que $\omega \neq 0$).

Le terme résonnant

On a donc montré que la contribution non-résonnante du terme typique (3.11) tend vers 0. Il reste à étudier le terme résonnant, qui est défini comme,

$$II := \frac{t}{L^{D+(D-2)}} \sum_{n^2=p^2} \Phi(\frac{n}{L}, \frac{p}{L}) . \tag{3.15}$$

Ce type de somme avec contrainte quadratique est précisément pris en compte dans le Théorème 3.2. Le calcul "modèle" présenté ici justifie ainsi, dans un cas particulier, le fait que le Théorème 3.1 est conséquence du Théorème 3.2: dans le cas général en effet, on est amené à manipuler des sommes du type (3.11) avec un grand nombre de variables $n, k_1, \cdots, k_N$, et d'exponentielles complexes fortement oscillantes, et l'approche présentée ci-dessus permet de montrer que seule la contribution résonnante $n^2 = k_1^2 = \cdots = k_N^2$ importe à la limite. Le théorème 3.2 permet alors de conclure.

Terminons ce paragraphe en mentionnant au passage que, en dimension $D \geq 5$, il est très aisé de montrer que le terme (3.15) est borné, en utilisant la borne bien connue,

$$\begin{aligned} \#\{n \in \mathbb{Z}^D \text{ t.q. } n^2 = L^2\} &\sim_{L\to\infty} \frac{\Gamma(1/2)^D}{\Gamma(D/2)} \mathfrak{S}(L^2)\, L^{D-2} \qquad (3.16) \\ &\leq C L^{D-2} \,. \end{aligned}$$

Le calcul de la limite du terme (3.15) est même possible lorsque Φ ne dépend que de n^2/L^2 et p^2/L^2 en utilisant uniquement l'asymptotique (3.16). Lorsque Φ dépend aussi des variables angulaires $n/|n|$ et $p/|p|$, le calcul est plus délicat et nécessite vraiment l'usage de l'information plus précise (3.8).

Références

[BGW] J. Bourgain, F. Golse, B. Wennberg, *On the distribution of free path lengths for the periodic Lorentz gas*, Comm. Math. Phys., Vol. 190, p. 491-508 (1998).

[Bo] R.W. Boyd, **Nonlinear Optics**, Academic Press (1992).

[Ca1] F. Castella, *On the derivation of a Quantum Boltzmann Equation from the periodic Von-Neumann equation*, Math. Mod. An. Num., Vol. 33, N. 2, p. 329-350 (1999).

[Ca2] F. Castella, *From the Von-Neumann equation to the Quantum Boltzmann equation in a deterministic framework*, à paraitre dans J. Stat. Phys. (2001).

[Ca3] F. Castella, *Identifying the Born series*, Travail en cours.

[CD] F. Castella, P. Degond, *Convergence de l'équation de Von-Neumann vers l'équation de Boltzmann Quantique dans un cadre dterministe*, C. R. Acad. Sci., t. 329, sér. I, p. 231-236 (1999).

[CP1] F. Castella, A. Plagne, *A distribution result for slices of sums of squares*, à paraitre dans Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.

[CP2] F. Castella, A. Plagne, *Non-derivation of The quantum Boltzmann equation from the periodic Von-Neumann equation*, Preprint (2001).

[Co] M. Combescot, *Is there a generalized Fermi Golden Rule ?*, Preprint (1999).

[EY] L. Erdös, H.T. Yau, *Linear Boltzmann equation as scaling limit of quantum Lorentz gas*, Comm. Pure Appl. Math., Vol. 53, N. 6, pp. 667-735 (2000).

[HLW] T.G. Ho, L.J. Landau, A.J. Wilkins, *On the weak coupling limit for a Fermi gas in a random potential*, Rev. Math. Phys., Vol. 5, N. 2, p. 209-298 (1993).

[Ja] R. Jancel, **Foundations of Classical and Quantum Statistical Mechanics**, Pergamon, Braunschweig (1969).

[KL] W. Kohn, J.M. Luttinger, Phys. Rev., Vol. 108, p. 590 (1957).

[KPR] J.B. Keller, G. Papanicolaou, L. Ryzhik, *Transport equations for elastic and other waves in random media*, Preprint (1996).
[Ku] R. Kubo, J. Phys. Soc. Jap., Vol. 12 (1958).
[La] L.J. Landau, *Observation of Quantum Particles on a Large Space-Time Scale*, J. Stat. Phys., Vol. 77, N. 1-2, pp. 259-309 (1994).
[Li] G. Lindblad, *On the generators of Quantum dynamical semigroups*, Comm. Math. Phys., Vol. 48, pp. 119-130 (1976).
[NM] A. C. Newell, J. V. Moloney, **Nonlinear Optics**, Advanced Topics in the Interdisciplinary Mathematical Sciences, Addison-Wesley Publishing Company (1992).
[Ni1] F. Nier, *Asymptotic Analysis of a scaled Wigner equation and Quantum Scattering*, Transp. Theor. Stat. Phys., Vol. 24, N. 4 et 5, p. 591-629 (1995).
[Ni2] F. Nier, *A semi-classical picture of quantum scattering*, Ann. Sci. Ec. Norm. Sup., 4. Sér., t. 29, p. 149-183 (1996).
[Pa] W. Pauli, *Festschrift zum 60. Geburtstage A. Sommerfelds*, p. 30, Hirzel, Leipzig (1928).
[RS] M. Reed, B. Simon, **Methods of modern mathematical physics**, Academic Press (1972).
[SSL] M. Sargent, M.O. Scully, W.E. Lamb, **Laser Physics**, Addison-Wesley (1977).
[Sp1] H. Spohn, *Derivation of the transport equation for electrons moving through random impurities*, J. Stat. Phys., Vol. 17, N. 6, p. 385-412 (1977).
[Sp2] H. Spohn, *Kinetic equations from Hamiltonian dynamics: Markovian limits*, Rev. Mod. Phys., Vol. 53, N. 3, pp. 569-615 (1980).
[Sp3] H. Spohn, **Large Scale Dynamics of interacting particles**, Springer, Berlin (1991).
[VH1] L. Van Hove, Physica, Vol. 21 p. 517 (1955).
[VH2] L. Van Hove, Physica, Vol. 23 p. 441 (1957).
[VH3] L. Van Hove, in **Fundamental Problems in Statistical Mechanics**, E.G.D. Cohen ed., p. 157 (1962).
[Zw] R. Zwanzig, **Quantum Statistical Mechanics**, P.H.E. Meijer ed., Gordon and Breach, New-York (1966).