



HAL
open science

L'entropie, de Clausius aux inégalités fonctionnelles

Ivan Gentil

► **To cite this version:**

| Ivan Gentil. L'entropie, de Clausius aux inégalités fonctionnelles. 2020. hal-02464182v1

HAL Id: hal-02464182

<https://hal.science/hal-02464182v1>

Preprint submitted on 3 Feb 2020 (v1), last revised 9 Nov 2020 (v2)

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

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

L'entropie, de Clausius aux inégalités fonctionnelles

Ivan Gentil*

January 28, 2020

Abstract

Dans ce document, on s'intéresse à l'entropie. Il a été préparé à l'occasion d'un colloquium donné le 12 avril 2019 à l'Université Paris Descartes que je remercie pour l'invitation. Le but est de décrire l'entropie dans le prolongement de sa définition proposée par le physicien Clausius. En effet, Clausius expose le second principe de la thermodynamique et définit aussi le concept d'entropie. Au lieu de définir simplement une fonctionnelle, fondamentale pour montrer son second principe, il va en fait définir un concept suffisamment général pour qu'il soit utilisé dans de très nombreux domaines des mathématiques. Nous illustrons ici les liens entre ce concept et les flots de gradient en dimension finie et infinie, avec comme exemples, l'équation de la chaleur ou l'équation des milieux poreux qui mènent à l'inégalité optimale de Sobolev.

1 L'entropie proposée par Clausius

On retrouve 6 millions de fois le terme Entropy sur le moteur de recherche Ecosia et près de 40 millions sur Google. Il apparaît 41000 fois dans Zentrablatt, ce qui représente un peu plus de 1% des entrées. Dans tous les cas, ce terme est tellement présent que l'on ne peut pas être exhaustif dans une courte introduction. Bien entendu, ce n'est pas la première présentation de l'entropie, il en existe bien d'autres...

Une fois n'est pas coutume, on sait quand ce mot a été inventé, c'est en 1865 dans un article de Rudolf Julius Emmanuel Clausius, physicien allemand du milieu du XIX^e siècle, c.f. [Cla65].

Avant de parler du contenu scientifique de l'article, arrêtons-nous sur sa forme. Cet article est publié dans la revue de mathématiques *Journal de mathématiques pures et appliquées* en 1865. Rappelons que c'est un des plus vieux journaux de mathématiques existant, fondé par Joseph Liouville en 1836, juste après le journal de Crelle (*Journal für die reine und angewandte Mathematik*) qui a été fondé, lui, en 1826. On peut se demander pourquoi Clausius choisit un journal de mathématiques et pourquoi celui-ci en langue française. Le journal de Crelle existe et est allemand ! Est-ce le prestige de ce nouveau journal français ? C'est d'autant plus étonnant car Clausius a publié la très grande majorité de ses articles en allemand, dans *Annalen der Physik* dont la publication commence dès 1790 et aussi au journal de Crelle. Ce qui est certain c'est qu'à cette époque, le choix du journal est fondamental pour une diffusion rapide des idées contrairement à maintenant, où le choix d'une revue est plus lié à son prestige et à la carrière.

*Institut Camille Jordan, Umr Cnrs 5208, Université Claude Bernard Lyon 1, 43 boulevard du 11 novembre 1918, F-69622 Villeurbanne cedex. gentil@math.univ-lyon1.fr

Clausius n'écrivait probablement pas assez bien le français puisque son article a été traduit par un traducteur professionnel, non mathématicien.

Cet article est clairement important car Clausius y formule le second principe de la thermodynamique en définissant l'entropie. On peut en dégager deux choses importantes.

1. Il participe à l'élaboration du second principe de la thermodynamique : l'irréversibilité des phénomènes physiques lors d'échanges thermiques. Il s'appuie sur des travaux précédents du physicien Sadi Carnot, mort à 36 ans en 1832. Notons que Carnot n'a publié qu'un seul ouvrage en 1824 intitulé *Réflexions sur la puissance motrice du feu*, livre fondateur de la thermodynamique, même si ce mot a été inventé plus tard. Carnot souhaite, dans son livre, améliorer ce qu'il appelle la machine à feu, dont l'exemple fondamental est la machine à vapeur inventé à la fin du XIX^e.
2. Pour démontrer ce second principe Clausius introduit le concept d'entropie : exhiber une fonctionnelle qui montrera l'irréversibilité d'un phénomène physique. Il comprend qu'il y a deux notions importantes, l'énergie et ce nouveau concept. Il a donc cherché un mot proche au mot *Énergie*. Son idée est d'utiliser la racine du mot grecque $\eta\rho\rho\pi\eta$ qui signifie transformation, ou plutôt *en transformation*. L'utilisation de cette racine grecque lui donne une consonance universelle et le mot "entropie" s'écrit presque de la même façon dans toute les langues utilisant l'alphabet latin. Il pense, et l'histoire lui a donné raison, que ce mot représente un concept général.

Ce mot va effectivement rester et être largement utilisé dans de nombreux domaines. Clausius note l'entropie S et l'assimile à *du désordre qui ne peut que croître*. Citons l'exemple récent et emblématique de Perelman définit sa propre entropie, fonctionnelle centrale dans sa preuve de la conjecture de Poincaré. Dans sa célèbre prépublication [Per02] de 2002, Perelman note aussi l'entropie S , comme Clausius. Bien entendu Perelman n'est pas le seul, chacun définit et utilise sa propre entropie.

Clausius termine son papier par des considérations générales, bien connues maintenant, qui sont les deux principes de la thermodynamique. Nous les reproduisons tels qu'ils sont écrits dans son article :

- *L'énergie de l'univers est constant*
- *L'entropie de l'univers tend vers un maximum*

A l'école, on apprend plutôt que *l'entropie d'un système isolé est croissante*.

Illustrons simplement le concept proposé par Clausius avec l'équation de la chaleur dans \mathbf{R}^n ,

$$\begin{cases} \partial_t \mu_t = \Delta \mu_t, t > 0, \\ \mu_0 \in \mathcal{P}(\mathbf{R}^n). \end{cases}$$

Rappelons que partant d'une probabilité μ_0 sur \mathbf{R}^n , cette équation admet une unique solution régulière sur $\mathbf{R}_+^* \times \mathbf{R}^n$, qui est un flot dans l'ensemble des mesures de probabilité dans \mathbf{R}^n , noté $\mathcal{P}(\mathbf{R}^n)$,

$$[0, \infty) \ni t \mapsto \mu_t \in \mathcal{P}(\mathbf{R}^n).$$

Boltzmann a compris en 1872, soit seulement quelques années après l'article de Clausius, les deux points fondamentaux de Clausius : *l'irréversibilité du phénomène physique* et le *concept de l'entropie*. Ainsi il définit sa propre entropie, appelée maintenant entropie de Boltzmann.

Pour toute mesure de probabilité $\mu \in \mathcal{P}(\mathbf{R}^n)$ admettant une densité par rapport à la mesure de Lebesgue que l'on note abusivement aussi μ ,

$$\text{Ent}(\mu) = \int \mu \log \mu = \int \log \frac{d\mu}{dx} d\mu \in [0, \infty]. \quad (1)$$

Cette entropie est proposée par Boltzmann en 1872 dans son célèbre théorème H , (nous proposons ici seulement une version simplifiée). L'entropie de Boltzmann diffère de l'entropie thermodynamique de Clausius mais c'est la même que celle utilisée par Shannon au XX^e siècle, avec un signe opposé. Citons le cas de Nash qui utilise aussi l'entropie de Boltzmann en 1958 pour démontrer dans un article célèbre, la régularité d'équations elliptiques et paraboliques.

Ainsi, pour simplifier, partant d'une donnée initiale μ_0 à densité régulière et d'entropie finie (par exemple dans l'espace de Schwartz), si on dérive l'entropie de Boltzmann le long du flot de la chaleur, on obtient pour $t \geq 0$,

$$\frac{d}{dt} \text{Ent}(\mu_t) = \int (1 + \log \mu_t) \partial_t \mu_t = \int \Delta \mu_t \log \mu_t = - \int \nabla \mu_t \nabla \log \mu_t = - \int \frac{|\nabla \mu_t|^2}{\mu_t}, \quad (2)$$

où le point clé est l'utilisation d'une intégration par parties dans la troisième égalité. L'entropie du système est toujours décroissante. On ne peut pas revenir en arrière dans une évolution naturelle. Si la condition initiale est par exemple une masse de Dirac en 0 ($\mu_0 = \delta_0$ et dans ce cas le calcul donné en (2) n'est valable que pour $t > 0$), la chaleur va se diffuser dans l'espace tout entier. Il est impossible de revenir à une masse de Dirac, autrement dit la diffusion de la chaleur a un sens, celui donné par *la flèche du temps*. Nous concluons que **l'évolution de cette transformation physique est irréversible**. Ce qui est important de remarquer c'est que pour démontrer l'irréversibilité de l'équation de la chaleur, la fonctionnelle d'entropie est seulement un outil. L'entropie de Boltzmann est une fonctionnelle remarquable, comme nous le verrons en section 3, mais il y en a d'autres qui montrent d'irréversibilité de l'équation de la chaleur, comme par exemple la norme L^p ($p > 1$) de la densité, $\mu \mapsto \int \mu^p$.

Bien entendu, toutes les transformations physiques ne sont pas forcément irréversibles. Par exemple, la chute libre d'un corps satisfait à l'équation de Newton qui est, elle, une équation réversible. Si on renvoie le corps avec une vitesse inversée, il retournera à sa place initiale ! L'équation de Newton est une équation d'ordre 2 alors que l'équation de la chaleur peut-être vue comme une équation d'ordre 1, ce que nous verrons en section 3.

Il est amusant de noter que les terminologies sont assez paradoxales. Si comme nous venons de le voir, l'équation de la chaleur est une équation irréversible, elle repose sur le mouvement brownien qui est lui un processus stochastique réversible, si on renverse le temps (partant ici de la mesure de Lebesgue) la loi de l'ensemble du processus ne change pas.

En conclusion, le concept d'entropie est un outil qui s'adapte à ce que l'on veut étudier. Nous allons illustrer, dans les sections suivantes, son utilisation fondamentale dans l'étude des flots de gradient, en dimension finie qui est un cadre simple pour énoncer les propriétés et en dimension infinie, où l'on retrouve des résultats remarquables.

2 Flots de gradient en dimension finie et entropie

Explorerons maintenant le cas simple d'un flot de gradient, permettant d'illustrer la théorie de Bakry-Émery proposée en 1985 dans [BE85].

Considérons une fonction de classe \mathcal{C}^2 ,

$$E : \mathbf{R}^n \mapsto \mathbf{R},$$

vérifiant l'inégalité de convexité

$$\text{Hess } E \geq \rho \text{Id}, \quad (3)$$

avec $\rho > 0$.

Cette fonction vérifie alors $\lim_{|x| \rightarrow \infty} E(x) = \infty$ et admet un minimum global atteint en un unique point $\beta \in \mathbf{R}^n$. On garde en mémoire l'exemple typique, $E(x) = |x|^2/2$ où $\rho = 1$.

• Flot de gradient

On note $(S_t(x))_{t \geq 0}$, $x \in \mathbf{R}^n$, la solution de l'équation différentielle ordinaire

$$\begin{cases} \dot{X}_t = -\nabla E(X_t); \\ X_0 = x. \end{cases}$$

On utilise la notation $\dot{X}_t = \frac{d}{dt}X_t$, désignant la vitesse de la trajectoire $(X_t)_{t \geq 0}$.

On dit que $(S_t)_{t \geq 0}$ est le *flot de gradient de E par rapport à la métrique euclidienne, celle qui définit le gradient usuel*. Dans l'exemple classique, $E(x) = |x|^2/2$, la solution partant de x est simplement $S_t(x) = e^{-t}x$, solution d'une équation différentielle ordinaire, linéaire et de degré 1.

• Identité de de Bruijn

Nous appelons E la fonctionnelle d'entropie du système, on a

$$\frac{d}{dt}E(S_t(x)) = -\nabla E(S_t(x)) \frac{d}{dt}S_t(x) = -|\nabla E(S_t(x))|^2 < 0. \quad (4)$$

L'opposé du terme de droite est appelé *la production d'entropie* (appelé peut-être à tort énergie) et cette identité porte parfois le nom de de Bruijn.

Pour les mêmes raisons que précédemment, ce phénomène physique est irréversible. Si on imagine $S_t(x)$ comme étant la position d'une bille à l'instant t , celle-ci va descendre vers β , le point où E réalise son unique minimum global. C'est exactement la même chose que la chaleur, la bille ne remontera pas la pente.

• Méthode de Bakry-Émery

Clausius invente le concept d'entropie, Boltzmann propose de dériver l'entropie le long du flot. L'idée fondamentale de Bakry et Émery est de dériver une seconde fois l'entropie le long du flot,

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dt^2}E(S_t(x)) &= -\frac{d}{dt}|\nabla E(S_t(x))|^2 = -2\nabla E(S_t(x)) \frac{d}{dt}\nabla E(S_t(x)) = \\ &= 2\nabla E(S_t(x))\text{Hess } E(S_t(x))\nabla E(S_t(x)). \end{aligned}$$

En utilisant l'inégalité $\text{Hess } E \geq \rho \text{Id}$, on obtient

$$\frac{d}{dt}|\nabla E(S_t(x))|^2 \leq -2\rho|\nabla E(S_t(x))|^2,$$

soit donc après intégration sur l'intervalle $[0, t]$,

$$|\nabla E(S_t(x))|^2 \leq e^{-2\rho t}|\nabla E(x)|^2. \quad (5)$$

Sous la condition de convexité (3), la production d'entropie décroît vers 0 avec une vitesse exponentielle et explicite.

• **Inégalité entropie-production d'entropie**

On peut montrer que $\lim_{t \rightarrow \infty} S_t(x) = \beta$. En effet, $\nabla E(S_t(x))$ tend vers 0 grâce à l'inégalité (5) et β est le seul point qui annule le gradient de E .

Ainsi on a

$$E(x) - E(\beta) = E(S_0(x)) - E(\lim_{t \rightarrow \infty} S_t(x)) = - \int_0^\infty \frac{d}{dt} E(S_t(x)) dt = \int_0^\infty |\nabla E(S_t(x))|^2 dt \leq \int_0^\infty e^{-2\rho t} |\nabla E(x)|^2 dt = \frac{1}{2\rho} |\nabla E(x)|^2.$$

On a ainsi démontré l'inégalité suivante

$$E(x) - E(\beta) \leq \frac{1}{2\rho} |\nabla E(x)|^2 = - \frac{1}{2\rho} \frac{d}{dt} E(S_t(x)) \Big|_{t=0}, \tag{6}$$

qui est une inégalité entre l'entropie et la production d'entropie. Elle peut apparaître comme une simple inégalité de convexité mais elle a des conséquences intéressantes.

On remarque que cette inégalité est optimale au sens où pour l'exemple classique, $E(x) = |x|^2/2$ on a une égalité. Par ailleurs, le flot de gradient $(S_t(x))_{t \geq 0}$ est une interpolation remarquable entre x et β (lorsque $t = 0$ et $t = \infty$), permettant de démontrer une inégalité de type (6).

• **Convergence à l'équilibre du flot de gradient**

De cette inégalité (6) on exhibe un taux explicite de la convergence à l'équilibre du flot de gradient. Nous savions déjà que le flot $(S_t(x))_{t \geq 0}$ convergeait vers β mais on peut maintenant préciser la vitesse et l'espace naturel. En effet, il est facile de démontrer que l'inégalité entropie-production d'entropie (6) (pour un certain β) est équivalente à la convergence exponentielle en l'entropie du flot de gradient. Plus précisément pour tout $x \in \mathbf{R}^n$ et $t \geq 0$,

$$0 \leq E(S_t(x)) - E(\beta) \leq e^{-2\rho t} (E(x) - E(\beta)).$$

Cette simple méthode a été utilisée un très grand nombre de fois depuis 1985 l'année de parution du papier de Bakry-Émery au *Séminaire de probabilités*, [BE85]. Nous l'illustrerons avec deux exemples dans la section suivante.

3 Que se passe-t-il en dimension infinie ?

Une généralisation intéressante aux flots de gradient en dimension infinie a été proposée par Félix Otto en particulier dans [Ott01] et plus tôt dans l'algorithme JKO proposé par Jordan, Kinderlehrer et Otto, cf. [JKO98]. C'est Villani qui lui a donné son nom, *le calcul d'Otto*, dans son ouvrage monumental [Vil09].

Ces travaux apportent une nouvelle utilisation de la distance de Wasserstein. L'idée est simple : montrer qu'un flot de mesures comme par exemple l'équation de la chaleur est simplement le flot de gradient d'une fonctionnelle sur l'espace des mesures, considéré avec une métrique adaptée. Considérer l'équation de la chaleur comme un flot de gradient n'est pas une idée nouvelle mais Otto propose une nouvelle métrique, plus naturelle que nous détaillons ici.

Nous nous permettons ici, de ne pas être rigoureux. De nombreux problèmes techniques ont été réglés en partie dans les travaux de Ambrosio, Gigli et Savaré, on pourra par exemple consulter l'ouvrage de référence [AGS08]. Soit $M = \mathcal{P}_2(\mathbf{R}^n)$, l'ensemble des mesures de probabilités dans \mathbf{R}^n , absolument continues par rapport à la mesure de Lebesgue et ayant un moment d'ordre 2 fini. On confond de nouveau la mesure de probabilité avec sa densité.

Otto a l'idée considérer M comme une variété riemannienne de dimension infinie où la distance de Wasserstein est simplement la distance riemannienne.

• **Equation de continuité et vélocité**

Soit un chemin dans l'ensembles des probabilités,

$$t \mapsto \mu_t \in M = \mathcal{P}_2(\mathbf{R}^n),$$

alors il existe une unique fonction $t \mapsto \Phi_t$ telle que

$$\partial_t \mu_t = -\text{Div}(\mu_t \nabla \Phi_t), \tag{7}$$

où Div est l'opérateur divergence dans \mathbf{R}^n . Bien entendu, pour que l'équation de continuité (7) soit vérifiée, le chemin $(\mu_t)_{t \geq 0}$ doit vérifier quelques propriétés. Sans entrer dans les détails, il suffit que le chemin il soit lisse, à densité strictement positive et qu'il soit absolument continue dans l'espace de Wasserstein dans un sens expliqué dans [AGS08, Chap. 8].

Nous allons représenter la quantité $\partial_t \mu_t$ par la fonction $\nabla \Phi_t$ et on note la vélocité du chemin par

$$\dot{\mu}_t = \nabla \Phi_t,$$

Utilisée de cette façon, *la vélocité* est un anglicisme qui pourrait être remplacé par *le vecteur vitesse*.

• **Espace tangent et métrique**

Par l'équation de continuité, on a défini la vélocité du chemin $(\mu_t)_{t \geq 0}$ (ayant suffisamment de régularité). L'espace tangent est donc naturellement défini à partir de la vélocité, soit $\mu \in M$, alors

$$T_\mu M = \{\nabla \Phi, \Phi : \mathbf{R}^n \mapsto \mathbf{R}\}.$$

De façon rigoureuse, l'espace tangent est l'adhérence de cet espace. La métrique proposée par Otto est la suivante, pour tout $\nabla \Phi, \nabla \Psi \in T_\mu M$,

$$\langle \nabla \Phi, \nabla \Psi \rangle_\mu = \int \nabla \Phi \cdot \nabla \Psi d\mu. \tag{8}$$

• **Distance de Wasserstein**

La distance de Wasserstein, qui s'appelle aussi (plus justement) distance de Monge-Kantorovich, est définie par : soit $\mu, \nu \in M$,

$$W_2(\mu, \nu) = \inf \sqrt{\iint |x - y|^2 d\pi(x, y)},$$

où l'infimum est pris sur l'ensemble des probabilités $\pi \in \mathcal{P}(\mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^n)$ ayant pour marginales μ et ν .

Dans [BB00], J.-D. Benamou et Y. Brenier montrent que pour $\mu, \nu \in M$, mesures régulières et ayant un moment d'ordre 2,

$$W_2(\mu, \nu) = \inf \sqrt{\int_0^1 \int |\nabla \Phi_t|^2 d\mu_t dt},$$

où l'infimum est pris sur l'ensemble des chemins $(\mu_t)_{t \in [0,1]}$ joignant μ à ν et $\nabla \Phi_t$ est la vélocité du chemin $(\mu_t)_{t \in [0,1]}$ considéré.

En d'autres termes, la distance de Wasserstein est la distance riemannienne sur M associée à la métrique définie en (8). La métrique définie par le produit scalaire (8) est souvent appelée métrique d'Otto (ou bien métrique de Wasserstein mais ce terme n'est pas forcément approprié).

• **Gradient et hessienne d'une fonctionnelle**

De la métrique, on peut calculer le gradient d'une fonctionnelle, élément de l'espace tangent. Prenons par exemple l'entropie de Boltzmann définie en (1). Si on prend un chemin $(\mu_t)_{t \geq 0}$ de vélocité $\dot{\mu}_t = \nabla \Phi_t$, alors

$$\frac{d}{dt} \text{Ent}(\mu_t) = \frac{d}{dt} \int \mu_t \log \mu_t = - \int \log \mu_t \text{Div}(\mu_t \nabla \Phi_t) = \int \nabla \log \mu_t \cdot \nabla \Phi_t \mu_t = \langle \nabla \log \mu_t, \dot{\mu}_t \rangle_{\mu_t}.$$

Ainsi, le gradient de l'entropie au point $\mu \in M$ que l'on note dans ce contexte $\text{grad}_\mu \text{Ent}$ est donné par,

$$\text{grad}_\mu \text{Ent} = \nabla \log \mu.$$

De la métrique, on peut aussi définir une dérivée covariante, basée sur une connexion riemannienne. Par ce biais, on peut définir les géodésiques (appelées géodésiques de McCann) dans l'espace de Wasserstein et pour finir la hessienne d'une fonctionnelle.

En effet si $\mathcal{F} : M \mapsto \mathbf{R}$ est une fonctionnelle sur M , et si $(\mu_s)_{s \in [0,1]}$ une géodésique (à vitesse constante) de vélocité $(\dot{\mu}_s)_{s \in [0,1]}$, on peut définir la hessienne au point μ_s , appliquée au vecteur tangent $\dot{\mu}_s$, de la façon suivante :

$$\text{Hess}_{\mu_s} \mathcal{F}(\dot{\mu}_s, \dot{\mu}_s) = \frac{d^2}{ds^2} \mathcal{F}(\mu_s),$$

si tout est assez régulier pour dériver deux fois. Pour obtenir une formule explicite nous avons besoin de l'équation des géodésiques. Dans entrer dans les détails techniques, en particulier les problèmes délicats de régularité, une géodésique $(\mu_s)_{s \in [0,1]}$ vérifie de façon formelle le système différentielle suivant

$$\begin{cases} \partial_s \mu_s + \text{Div}(\mu_s \nabla \Phi_s) = 0, \\ \partial_s \Phi_s + \frac{1}{2} |\nabla \Phi_s|^2 = 0. \end{cases} \quad (9)$$

Par ce biais, au moins de façon formelle, on peut calculer $\frac{d^2}{ds^2} \mathcal{F}(\mu_s)$ et obtenir une expression de la hessienne.

Reprenons l'exemple de l'entropie de Boltzmann. Soit $(\mu_s)_{s \in [0,1]}$ une géodésique de vélocité $(\nabla \Phi_s)_{s \in [0,1]}$, on a vu précédemment que

$$\frac{d}{ds} \text{Ent}(\mu_s) = \int \nabla \log \mu_s \cdot \nabla \Phi_s \mu_s = \int \nabla \mu_s \cdot \nabla \Phi_s.$$

Ainsi, de façon formelle en supposant que tout est régulier, en particulier pour le système (9),

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{ds^2} \text{Ent}(\mu_s) &= \int \nabla \partial_s \mu_s \cdot \nabla \Phi_s + \int \nabla \mu_s \cdot \nabla \partial_s \Phi_s = \\ &= - \int \nabla \text{Div}(\mu_s \nabla \Phi_s) \cdot \nabla \Phi_s - \frac{1}{2} \int \nabla \mu_s \cdot \nabla |\nabla \Phi_s|^2 = \\ &= \int \left(-\nabla \Phi_s \cdot \nabla \Delta \Phi_s + \frac{1}{2} \Delta |\nabla \Phi_s|^2 \right) \mu_s, \end{aligned}$$

où la dernière ligne s'obtient après 3 intégrations par parties.

Par ce calcul, au point $\mu \in M$ et appliquée au vecteur tangent $\nabla \Phi \in T_\mu M$, l'expression de la hessienne de l'entropie est donnée par

$$\text{Hess}_\mu \text{Ent}(\nabla \Phi, \nabla \Phi) = \int \left(\frac{1}{2} \Delta |\nabla \Phi|^2 - \nabla \Phi \cdot \nabla \Delta \Phi \right) \mu.$$

On a donc maintenant tous les ingrédients pour appliquer en dimension infinie, ce qui a été fait précédemment en dimension finie.

Illustration avec deux exemples remarquables :

Même si ce qui précède est formelle, due aux problèmes de régularité, dans les deux exemples suivants, les résultats sont rigoureux car ils reposent sur des équations de types paraboliques qui sont régulières.

1. Équation de la chaleur.

Considérons l'équation de la chaleur dans \mathbf{R}^n ,

$$\partial_t \mu_t = \Delta \mu_t = \text{Div}(\nabla \mu_t) = \text{Div}(\mu_t \nabla \log \mu_t).$$

Ainsi, dans le calcul d'Otto, la vitesse du chemin de probabilité $\mathbf{R}^+ \ni t \mapsto \mu_t$, est donnée par

$$\dot{\mu}_t = -\nabla \log \mu_t.$$

Ainsi, si on reprend l'entropie de Boltzmann $\text{Ent}(\mu) = \int \mu \log \mu$, on a vu précédemment que $\text{grad}_\mu \text{Ent} = \nabla \log \mu$, ainsi on a

$$\dot{\mu}_t = -\text{grad}_{\mu_t} \text{Ent}.$$

Donc l'équation de la chaleur est le flot de gradient de l'entropie de Boltzmann dans la métrique d'Otto. Mais alors, tout ce qui précède s'applique, il reste à comprendre quand la hessienne de la fonctionnelle Ent est uniformément minorée par une constante strictement positive. On a vu précédemment que

$$\text{Hess}_\mu \text{Ent}(\nabla \Phi, \nabla \Phi) = \int \left(\frac{1}{2} \Delta |\nabla \Phi|^2 - \nabla \Phi \cdot \nabla \Delta \Phi \right) \mu = \int \|\text{Hess } \Phi\|^2 \mu,$$

où $\|\text{Hess } \Phi\|^2 = \sum_{i,j=1}^n (\partial_{i,j} \Phi)^2$. Maintenant, si on souhaite obtenir une inégalité de type (3), soit donc

$$\text{Hess}_\mu \text{Ent}(\nabla \Phi, \nabla \Phi) = \int \|\text{Hess } \Phi\|^2 \mu \geq \rho \int |\nabla \Phi|^2 \mu,$$

pour toute fonction Φ il est nécessaire de supposer que $\rho = 0$.

C'est assez naturel car, dans \mathbf{R}^n , la solution de l'équation de la chaleur tend vers 0. Pour éviter ça, on peut, soit se placer dans une variété riemannienne compacte, soit modifier l'équation de la chaleur et ajouter une force de rappel, lui permettant de converger vers une distribution non nulle.

Ainsi, pour rester dans l'espace euclidien, nous considérons l'équation de Fokker-Planck,

$$\partial_t \mu_t = \Delta \mu_t + \text{Div}(x \mu_t) = \text{Div}\left(\mu_t \nabla \left[\log \mu_t + \frac{|x|^2}{2}\right]\right).$$

Cette équation admet une solution explicite et régulière partant par exemple d'une donnée initiale dans l'espace de Schwartz. Elle admet une unique solution stationnaire de masse 1, la mesure gaussienne standard,

$$\gamma(dx) = \exp\left(-\frac{|x|^2}{2}\right) \frac{dx}{(2\pi)^{n/2}}.$$

La vélocité de la solution $(\mu_t)_{t \geq 0}$ est par définition,

$$\dot{\mu}_t = -\nabla \left(\log \mu_t + \frac{|x|^2}{2}\right),$$

et est le flot de gradient de la fonctionnelle

$$\mathcal{F}(\mu) = \int \mu \log \mu + \frac{|x|^2}{2} \mu,$$

par rapport à la métrique d'Otto. Il n'est pas difficile de montrer que la hessienne de \mathcal{F} est uniformément minorée par constante $\rho = 1$, c'est à dire dans le langage d'Otto on peut montrer que

$$\text{Hess}_\mu \mathcal{F}(\nabla \Phi, \nabla \Phi) = \int \|\text{Hess} \Phi\|^2 \mu + \int \text{Hess}\left(\frac{|x|^2}{2}\right)(\nabla \Phi, \nabla \Phi) \mu \geq \int |\nabla \Phi|^2 \mu.$$

De façon condensée, cette inégalité s'écrit

$$\text{Hess}_\mu \mathcal{F} \geq \text{Id}_\mu,$$

où Id_μ représente la métrique au point $\mu \in M$. On retrouve la même inégalité qu'en dimension finie, l'inégalité (3) avec la constante $\rho = 1$.

Le minimum de la fonctionnelle \mathcal{F} est atteint pour la mesure gaussienne standard γ . Ainsi en imitant ce qui se passe en dimension finie, la méthode de Bakry-Émery permet de démontrer l'inégalité suivante

$$\int \left|\nabla \left(\log \mu_t + \frac{|x|^2}{2}\right)\right|^2 \mu_t \leq e^{-2t} \int \left|\nabla \left(\log \mu_0 + \frac{|x|^2}{2}\right)\right|^2 \mu_0,$$

inégalité équivalente à (5) dans le cas finie dimensionnelle. L'inégalité entropie-production d'entropie s'écrit de la façon suivante, pour tout $\mu \in M$,

$$\mathcal{F}(\mu) - \mathcal{F}(\gamma) \leq \frac{1}{2} |\text{grad}_\mu \mathcal{F}|_\mu^2 = \frac{1}{2} \int \left|\nabla \left(\log \mu + \frac{|x|^2}{2}\right)\right|^2 \mu.$$

Après un changement de fonction, $\mu = \exp(-|x|^2/2)f$, cette inégalité prend la forme suivante, pour toute fonction f positive,

$$\int f \log \frac{f}{\int f d\gamma} d\gamma \leq \frac{1}{2} \int \frac{|\nabla f|^2}{f} d\gamma.$$

Celle-ci s'appelle l'inégalité de Sobolev logarithmique pour la mesure gaussienne γ et a été démontrée par Gross en 1975 dans [Gro75]. Cette inégalité a une grande importance en EDP, probabilités, géométrie...

2. L'équation des milieux poreux avec une force de rappel.

Considérons maintenant l'équation de Fokker-Planck non linéaire dans \mathbf{R}^n , $n > 2$, ou équation des milieux poreux avec un drift (en fait plutôt appelée équation des diffusions rapides puisque l'exposant, ici $1 - 1/n$, est dans l'intervalle $]0, 1[$),

$$\partial_t \mu = \frac{1}{n} \Delta \left(\mu^{1-1/n} \right) + \frac{n-1}{n} \text{Div}(\mu x) = \frac{n-1}{n} \text{Div} \left[\mu \nabla \left(-\mu^{-1/n} + \frac{|x|^2}{2} \right) \right]. \quad (10)$$

Partant d'une donnée initiale qui est une probabilité, la vélocité du flot est donnée par

$$\dot{\mu}_t = -\frac{n-1}{n} \nabla \left(-\mu_t^{1/n} + \frac{|x|^2}{2} \right).$$

Il n'est pas trop difficile de voir que

$$\dot{\mu}_t = -\text{grad}_{\mu_t} \mathcal{F},$$

où

$$\mathcal{F}(\mu) = \int \left(-\mu^{-1/n} + \frac{n-1}{n} \frac{|x|^2}{2} \right) \mu.$$

Un calcul un peu plus compliqué, si on ne s'y prend mal, permet de calculer la hessienne de \mathcal{F} . Au point μ et pour $\nabla \Phi$, élément de l'espace tangent, on obtient

$$\text{Hess}_{\mu} \mathcal{F}(\nabla \Phi, \nabla \Phi) = \frac{1}{n} \int (|\text{Hess} \Phi|^2 - \frac{1}{n} (\Delta \Phi)^2) \mu + \frac{n-1}{n} \int |\nabla \Phi|^2 \mu,$$

calcul effectué par exemple dans [OW06]. Puisque $|\text{Hess} \Phi|^2 = \sum_{i,j} (\partial_{ij} \Phi)^2$, par une inégalité de Cauchy-Schwarz,

$$|\text{Hess} \Phi|^2 - \frac{1}{n} (\Delta \Phi)^2 \geq 0.$$

Ainsi on obtient,

$$\text{Hess}_{\mu} \mathcal{F}(\nabla \Phi, \nabla \Phi) \geq \frac{n-1}{n} \int |\nabla \Phi|^2 \mu,$$

ce qui s'écrit aussi de la façon suivante,

$$\text{Hess}_{\mu} \mathcal{F} \geq \frac{n-1}{n} \text{Id}_{\mu}.$$

On retrouve encore le cas de la dimension finie (3) avec la constante $\rho = \frac{n-1}{n}$. Un calcul indépendant montre que la solution $(\mu_t)_{t \geq 0}$ converge, lorsque t tend vers l'infini, vers l'état stationnaire $\mu_{\infty} = (C + |x|^2/2)^{-n}$ où C est une constante de normalisation pour que μ_{∞}

soit une mesure de probabilité. On peut alors montrer une inégalité d'entropie-production d'entropie, pour toute mesure $\mu_0 \in M$,

$$\mathcal{F}(\mu_0) - \mathcal{F}(\mu_\infty) \leq \frac{n-1}{2n} \int \left| \nabla \left(\mu_0^{-1/n} - \frac{|x|^2}{2} \right) \right|^2 \mu_0 = -\frac{n}{2(n-1)} \frac{d}{dt} \mathcal{F}(\mu_t) \Big|_{t=0},$$

Ce qui est étonnant, c'est que cette inégalité de convexité n'est qu'une forme un peu barbare, et équivalente, de l'inégalité de Sobolev optimale dans \mathbf{R}^n ,

$$\|f\|_{L^{\frac{2n}{n-2}}(dx)} \leq C_{op} \|\nabla f\|_{L^2(dx)},$$

cette dernière inégalité se retrouve simplement après un changement de fonction et une intégration par parties. Notons que cette inégalité est attribuée à Sobolev en 1938 et que la constante optimale a été calculée par Talenti en 1976.

Il est remarquable de voir qu'une telle inégalité si importante en analyse, en EDP et en géométrie n'est qu'une inégalité de convexité le long d'un flot non linéaire. On voit bien dans la preuve que d'autres cas assez similaires peuvent être traités, on retrouve assez naturellement par cette méthode la famille des inégalités de Gagliardo-Nirenberg optimales montrées par M. del Pino et J. Dolbeault dans [DD02] ou bien l'inégalité de Sobolev dans une variété riemannienne [Dem08] avec des conditions de courbures.

Conclusion : Clausius a pu inventer un mot qui est entré dans le langage courant, mot désignant parfois le désordre. Par ailleurs, autour de ce mot, on trouve une notion ou bien un concept assez flou permettant son utilisation dans des domaines mathématiques contemporains. L'exemple de l'inégalité optimale de Sobolev est, il me semble, un exemple frappant.

Terminons par une citation de Ievgueni Zamiatine, tiré de *Nous autres (1920)*, *Alors voici : il y a deux forces en ce monde - l'entropie et l'énergie. L'entropie vise la paix et la béatitude, l'équilibre heureux - l'autre recherche la rupture des équilibres, la torture du mouvement infini.* Très probablement, la première utilisation de l'entropie en littérature.

Je tiens à remercier Louis Dupaigne pour ses remarques pertinentes lors de la rédaction de cette note.

References

- [AGS08] L. Ambrosio, N. Gigli, and G. Savaré. *Gradient flows in metric spaces and in the space of probability measures. 2nd ed.* Basel: Birkhäuser, 2nd ed. edition, 2008.
- [BB00] J.-D. Benamou and Y. Brenier. A computational fluid mechanics solution to the Monge-Kantorovich mass transfer problem. *Numer. Math.*, 84(3):375–393, 2000.
- [BE85] D. Bakry and M. Emery. Diffusions hypercontractives. *Sémin. de probabilités XIX, Univ. Strasbourg 1983/84, Proc., Lect. Notes Math. 1123, 177-206*, 1985.
- [Cla65] R. Clausius. Sur diverses formes facilement applicables qu'on peut donner aux équations fondamentales de la théorie mécanique de la chaleur. *J. Math. Pures Appl. (2)*, 10:361–400, 1865.
- [DD02] M. Del Pino and J. Dolbeault. Best constants for Gagliardo-Nirenberg inequalities and applications to nonlinear diffusions. *J. Math. Pures Appl. (9)*, 81(9):847–875, 2002.

- [Dem08] J. Demange. Improved Gagliardo-Nirenberg-Sobolev inequalities on manifolds with positive curvature. *J. Funct. Anal.*, 254(3):593–611, 2008.
- [Gro75] L. Gross. Logarithmic Sobolev inequalities. *Am. J. Math.*, 97:1061–1083, 1975.
- [JKO98] R. Jordan, D. Kinderlehrer, and F. Otto. The variational formulation of the Fokker-Planck equation. *SIAM J. Math. Anal.*, 29(1):1–17, 1998.
- [Ott01] F. Otto. The geometry of dissipative evolution equations: The porous medium equation. *Commun. Partial Differ. Equations*, 26(1-2):101–174, 2001.
- [OW06] F. Otto and M. Westdickenberg. Eulerian calculus for the contraction in the Wasserstein distance. *SIAM J. Math. Anal.*, 37(4):1227–1255, 2006.
- [Per02] G. Perelman. The entropy formula for the Ricci flow and its geometric applications. *Preprint*, 2002.
- [Vil09] C. Villani. *Optimal transport. Old and new*. Berlin: Springer, 2009.