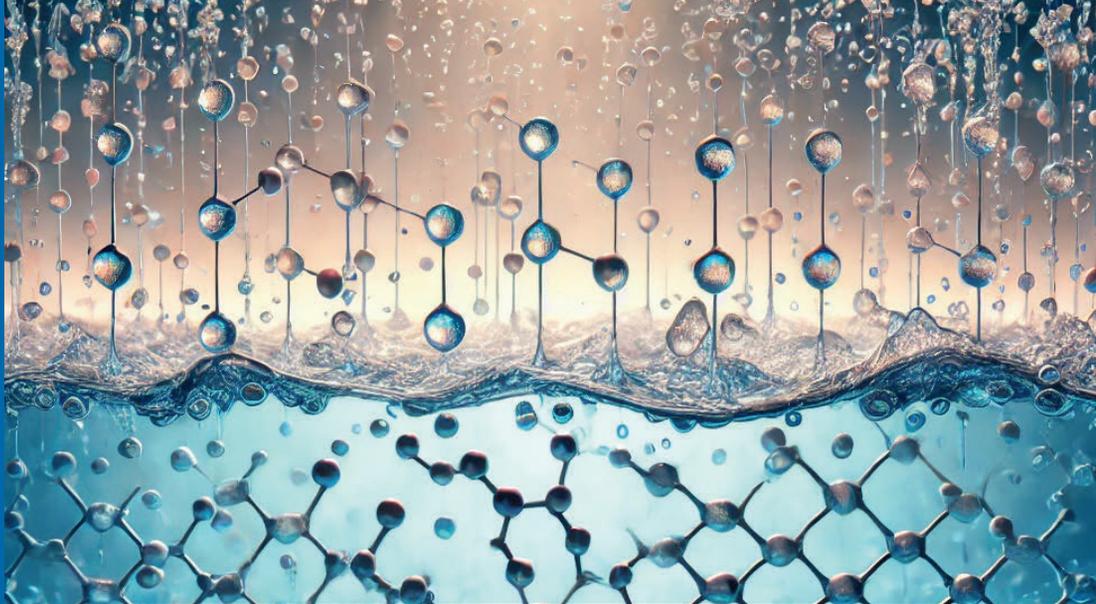


Les cours



Marcel Filoche

Éléments de physique statistique



PSL 

Presses des Mines

Marcel Filoche, *Éléments de physique statistique*, Presses des Mines, collection Les cours, 2025.

© Presses des MINES – TRANSVALOR, 2025
60, boulevard Saint-Michel – 75272 Paris Cedex 06 – France
presses@minesparis.psl.eu
www.pressedesmines.com

© Illustration de couverture: Les diverses phases de la matière : gaz - liquide - solide.
Image générée par un modèle d'IA OpenAI.

ISBN: 978-2-38542-691-0

Dépôt légal: 2025
Achevé d'imprimer en 2025 (Paris)

Cette publication a bénéficié du soutien de l'Institut Carnot M.I.N.E.S.
Tous droits de reproduction, de traduction, d'adaptation et d'exécution réservés pour tous les pays.

Éléments de physique statistique

Collection Les cours
Dans la même collection

- Marcel Filoche, Pierre Brun, *Éléments de physique quantique et de relativité.*
- Silvère Bonnabel et Michel Schmitt, *Cours de probabilités.*
- Samuel Forest, *Mécanique des milieux continus. Volume 1 : Théorie, Volume 2 : Pratique.*
- Pascal Debu, *Particules et noyaux.*
- Pierre Brun, *Introduction à la relativité.*
- Cong Toan Tran et Philippe Rivière, *Thermodynamic Energy System Modelling.*
- Chantal de Fouquet, *Exercices corrigés de géostatistique.*
- Renaud Gicquel, *Modéliser et simuler les technologies énergétique.*
- Pascal Debu, *Noyaux et radioactivité.*
- Ali Azarian et Yann Pollet, *Analyse fonctionnelle des systèmes.*
- Francis Maisonneuve, *Mathématiques 2 et 3 Exercices.*
- Bernard Wiesenfeld, *Une introduction à la neutronique.*
- Francis Maisonneuve, *Probabilités. Mathématiques 3. Mathématiques 2. Mathématiques 1.*
- Renaud Gicquel, *Introduction aux problèmes énergétiques globaux.*
- Francis Maisonneuve, *Mathématiques 3.*
- Francis Maisonneuve, *Mathématiques 1.*
- J. Adnot, D. Marchio, Ph. Rivière, *Cycles de vie des systèmes énergétiques.*
- Brigitte d'Andréa-Novet, Benoît Fabre, Pierre Jouvelot, *Acoustique-Informatique-Musique.*
- Jean-Claude Moison, Michel Nakhla, *Recherche opérationnelle.*
- Anne-Françoise Gourgues-Lorenzen, Jean-Marc Haudin, Jacques Besson, *Matériaux pour l'ingénieur.*
- Renaud Gicquel, *Systèmes énergétiques T. 3. Systèmes énergétiques T. 2. Systèmes énergétiques T. 1.*
- Thierry Weil, *Stratégie d'entreprise.*
- François Cauneau, *Mécanique des fluides.*
- Pierre Chauvet, *Aide-mémoire de géostatistique linéaire.*
- Dominique Marchio, Paul Reboux, *Introduction aux transferts thermiques.*
- François Engel, Frédéric Kletz, *Cours de comptabilité analytique.*
- François Engel, Frédéric Kletz, *Cours de comptabilité générale.*
- Jacques Bouchard, Jean-Paul Deffain, *Introduction au génie atomique.*
- Daniel Fargue, *Abrégé de thermodynamique : principes et applications.*
- Georges Pierron, *Introduction au traitement de l'énergie électrique.*
- Bernard Degrange, *Introduction à la physique quantique.*
- Michel Cohen de Lara, Brigitte d'Andréa-Novet, *Cours d'automatique.*
- Fixari Daniel, *Les Imperfections des marchés.*
- Jacques Lévy, *Introduction à la métallurgie générale.*

Marcel Filoche

Éléments de physique statistique



| PSL 

PRESSES **DES MINES**
L'excellence scientifique

Table des matières

Avant-propos	13
1 Aux origines de la physique statistique	15
1.1 La chute du déterminisme classique	16
1.1.1 Quelques ordres de grandeur	17
1.1.2 Notions sur les systèmes dynamiques	18
1.1.3 Le théorème de Liouville	20
1.2 La refondation probabiliste	22
À retenir de ce chapitre	23
I Le formalisme de la physique statistique à l'équilibre	25
2 La structure générale de la physique statistique	27
2.1 États individuels de particules quantiques libres	29
2.2 La comptabilité des micro-états	31
2.2.1 Particules classiques	31
2.2.2 Particules quantiques	31
2.3 Les ensembles statistiques	34
2.4 Systèmes extensifs et limite thermodynamique	35
2.5 Ergodicité	37
2.6 La dynamique probabiliste	37
2.7 L'apport de la physique quantique	38
2.8 La structure générale de la physique statistique	40
À retenir de ce chapitre	40
3 L'approche probabiliste	43
3.1 Les ensembles	43
3.2 L'équation maîtresse	44
3.3 Réversibilité microscopique et irréversibilité macroscopique	48
3.4 L'entropie	49
3.4.1 Le théorème H	52
À retenir de ce chapitre	56

4	Les systèmes isolés	57
4.1	L'ensemble microcanonique	57
4.1.1	Distribution statistique d'une variable interne	58
4.2	La température d'un système isolé	59
4.3	La thermodynamique des systèmes isolés	61
4.4	Les modèles à particules indépendantes	62
4.4.1	Particules indépendantes	62
4.4.2	L'approximation de Maxwell-Boltzmann	63
4.5	Le gaz parfait isolé	64
4.5.1	L'entropie du gaz parfait	64
4.5.2	Le paradoxe de Gibbs	68
4.6	Un système isolé simple : le cristal paramagnétique	70
4.6.1	L'entropie du cristal paramagnétique	71
4.6.2	Les températures négatives	73
4.6.3	Le refroidissement adiabatique	74
	À retenir de ce chapitre	76
4.7	Exercices	77
4.7.1	Paramagnétisme et ferromagnétisme dans un métal	77
5	Les systèmes fermés	79
5.1	L'ensemble canonique	80
5.1.1	La notion de thermostat	80
5.1.2	L'ensemble canonique	81
5.2	L'équation maîtresse et la loi de Gibbs	82
5.2.1	Le théorème H dans l'ensemble canonique	84
5.3	La fonction de partition canonique	86
5.3.1	Propriétés de la fonction de partition	88
5.4	Le gaz parfait classique : la loi des gaz parfaits	91
5.4.1	L'approximation continue	92
5.5	Le modèle d'Einstein de la capacité calorifique des solides	94
	À retenir de ce chapitre	99
5.6	Exercices	101
5.6.1	Défauts de Frenkel dans un cristal	101
5.6.2	Paramètre d'ordre dans un alliage binaire	101
6	Multiplicateurs de Lagrange	103
6.1	La généralisation de l'entropie	103
6.2	Les systèmes gaussiens : l'équivalence entre ensembles	107
	À retenir de ce chapitre	110

7	Les systèmes ouverts	111
7.1	L'ensemble grand-canonique	111
7.2	L'ensemble isotherme-isobare ou T-P	112
7.3	L'édifice mathématique de la physique statistique	113
7.3.1	La physique statistique issue de la thermodynamique . .	116
7.4	Résumé des ensembles	117
	À retenir de ce chapitre	120
II	Systèmes statistiques classiques et quantiques	123
8	Les fluides classiques	125
8.1	La théorie générale des fluides classiques dilués	125
8.1.1	L'approximation de Maxwell-Boltzmann pour les fluides	125
8.1.2	La décomposition de l'hamiltonien du système	126
8.1.3	La commutation des parties cinétique et potentiel de l'hamiltonien	127
8.1.4	Hypothèse de continuité de la densité d'états	128
8.1.5	La factorisation de la fonction de partition	129
8.2	Les gaz parfaits	131
8.2.1	Le gaz parfait monoatomique	131
8.2.2	La distribution de Maxwell des vitesses	131
8.2.3	Le théorème d'équipartition	133
8.3	Les gaz moléculaires et réels	136
8.3.1	Les degrés de liberté internes	136
8.3.2	Le gaz parfait diatomique	137
8.3.3	Les interactions moléculaires	142
8.3.4	Le gaz de van der Waals	144
	À retenir de ce chapitre	147
8.4	Exercices	149
8.4.1	Étude d'un gaz parfait en rotation uniforme	149
8.4.2	Étude de la sublimation d'un solide par un modèle simple	149
9	Les systèmes quantiques	151
9.1	Les statistiques de particules quantiques	151
9.1.1	La fonction de partition	152
9.1.2	Les bosons : la statistique de Bose-Einstein	155
9.1.3	Les fermions : la statistique de Fermi-Dirac	156
9.2	Les gaz quantiques	158
9.2.1	Le gaz de bosons : la condensation de Bose-Einstein . .	159
9.2.2	Le gaz de fermions : le gaz d'électrons libres d'un métal	161
9.2.3	La physique des semi-conducteurs	168
9.2.4	Le gaz de photons	171

À retenir de ce chapitre	180
9.3 Exercices	182
9.3.1 Le gaz de bosons bidimensionnel	182
9.3.2 Semi-conducteur à impuretés	182
9.3.3 Correction à l'approximation de Maxwell-Boltzmann	183
10 L'équilibre matière-rayonnement	187
10.1 Les interactions « photon-atome »	187
10.1.1 Processus du premier et du second ordre	187
10.1.2 L'absorption et l'émission d'un photon par un atome	190
10.2 Bilan microscopique de l'équilibre	190
10.2.1 Équation cinétique de l'atome à deux niveaux	191
10.2.2 Conséquences des relations entre les coefficients d'Einstein	193
10.2.3 L'émission stimulée dans le rayonnement thermique	195
10.3 Bilan macroscopique de l'équilibre	196
10.3.1 Pouvoir émissif et pouvoir absorbant : la loi de Kirchhoff	196
10.3.2 Le rayonnement thermique d'équilibre : le « corps noir »	198
10.3.3 La loi de Stefan	200
10.4 Cosmologie : le rayonnement fossile	202
10.4.1 L'expansion de l'Univers	202
10.4.2 Le rayonnement thermique cosmologique	204
10.4.3 La création d'ordre dans l'univers	207
À retenir de ce chapitre	208
10.5 Exercices	210
10.5.1 Expansion de l'univers	210
III Incursion dans les phénomènes hors d'équilibre	211
11 La diffusion : le mouvement sans force	213
11.1 La nature microscopique de la diffusion	213
11.1.1 Le mouvement aléatoire des molécules dans un gaz	215
11.1.2 Statistique temporelle des collisions	217
11.1.3 Le modèle de Drude	219
11.1.4 La marche aléatoire sur un réseau	222
11.2 Le modèle macroscopique continu de la diffusion	227
11.2.1 Diffusion à une dimension depuis une source ponctuelle	229
11.2.2 Solution générale unidimensionnelle	230
11.2.3 Quelques exemples de solutions de l'équation de diffusion	231
11.2.4 Cas des domaines bornés : les modes de diffusion	235
11.2.5 Quelques solutions stationnaires de l'équation de diffusion	236
11.2.6 Équivalence avec d'autres problèmes physiques	237
À retenir de ce chapitre	239

11.3 Exercices	241
11.3.1 Une application étonnante : la relation de Stokes-Einstein	241
11.3.2 Diffusion et dérive à l'échelle microscopique	244
12 La physique statistique moderne	245
Annexes mathématiques	247
A Transformée de Legendre	247
B Probabilités continues	247
B.1 Fonction caractéristique	248
B.2 Le théorème de la limite centrale	250
Solutions des exercices	252
Index	269

La multitude qui ne se réduit pas à l'unité est confusion ;
l'unité qui ne dépend pas de la multitude est tyrannie.

BLAISE PASCAL, *Pensées*

Avant-propos

La physique statistique est sans doute l'une des branches les plus étonnantes de la physique et des sciences de la nature en général. En effet, loin de s'intéresser à des objets ou à des systèmes précis, elle s'attache à l'étude des grands systèmes, c'est-à-dire des systèmes comportant un très grand nombre de degrés de liberté. En ce sens, elle n'est pas l'étude d'un « domaine » à proprement parler, mais plutôt une méthodologie permettant d'aborder et de démêler la complexité du monde physique réel. Elle peut être vue comme l'application des sciences de l'information à la physique des grands systèmes, et donc l'une des toutes premières ébauches d'une *science des données*.

Cet ouvrage ne se veut pas une description exhaustive des objets et outils de la physique statistique, mais a pour objectif de présenter les concepts fondamentaux et les étapes principales qui permettent de passer du déterminisme microscopique (qu'il soit classique ou quantique) à une approche probabiliste des grands systèmes à l'équilibre. Il est à noter toutefois que le dernier chapitre est à part, car consacré au transport par diffusion, un phénomène *hors d'équilibre*, mais dont l'importance historique et applicative est telle qu'il nous a semblé qu'il devait figurer dans cet ouvrage.

Pour revenir aux systèmes à l'équilibre, nous montrerons comment l'on peut retrouver, à partir de principes fondamentaux, les quantités macroscopiques déjà introduites sans démonstration en thermodynamique, pour les systèmes isolés, pour les systèmes fermés et pour les systèmes ouverts. Une fois établies les bases essentielles de la physique statistique des systèmes à l'équilibre, nous pourrons passer à la description des systèmes classiques les plus simples comme les fluides (gaz parfaits et fluides classiques). Nous verrons notamment le rôle joué par les interactions fondamentales dans l'équation d'état de ces fluides.

Enfin, nous aborderons les systèmes dans lesquels le caractère quantique des constituants élémentaires se manifeste *via* une statistique particulière (statistiques de Bose-Einstein et de Fermi-Dirac). En particulier, nous verrons comment la statistique de Bose-Einstein pour des particules relativistes de masse nulle permet de comprendre les propriétés thermodynamiques du rayonnement, ainsi que l'équilibre matière-rayonnement dans l'Univers.

Chapitre 1

Aux origines de la physique statistique

La physique statistique a pour objet l'étude des systèmes physiques à grand nombre de degrés de liberté. Plus précisément, elle se donne pour objectif d'établir les relations qui permettent de déduire les propriétés macroscopiques de ces systèmes à partir, d'une part, des propriétés microscopiques de leurs constituants individuels, et d'autre part, des règles d'organisation ou d'interaction entre ces mêmes constituants.

Elle fait ainsi le pont entre la physique microscopique (électromagnétisme, physique quantique, chimie moléculaire) qui permet de comprendre les comportements élémentaires des particules, des atomes, des molécules, voire de constituants plus élaborés (en biologie par exemple), et les modèles phénoménologiques qui décrivent le plus souvent la nature sous forme d'un milieu continu obéissant à des équations d'état ou d'évolution (mécanique des fluides, mécanique des milieux continus, thermodynamique, etc.).

Partant des interactions locales et des propriétés de symétrie des constituants, elle permet donc :

- de remonter à la nature profonde de caractéristiques macroscopiques comme la température, la pression, par ailleurs déjà connues empiriquement en thermodynamique ;
- de définir la notion d'*équilibre statistique* des systèmes à grand nombre de constituants, notamment à travers l'introduction d'un concept absent à l'échelle microscopique, l'*irréversibilité temporelle*, et sa mesure quantitative, l'*entropie* ;
- de prédire les transitions entre les différents équilibres macroscopiques d'un système (transitions de phase solide-liquide ou liquide-gaz, transition ferromagnétique, etc.) ;

- d'expliquer l'*émergence* de comportements d'ensemble des systèmes macroscopiques, et d'en déduire une compréhension qualitative et quantitative des propriétés électriques, magnétiques ou mécaniques de ces systèmes.

L'outil essentiel au cœur de cette démarche va être l'approche probabiliste. C'est elle qui va permettre de réduire la complexité en s'affranchissant de la nécessité de décrire de façon complète et minutieuse chaque état du système. C'est également à travers cette approche que va apparaître l'irréversibilité, et ceci bien que les processus microscopiques soient tous réversibles localement (on parle de *micro-réversibilité*). C'est enfin cette description probabiliste qui va permettre de faire émerger les différents *ensembles statistiques*, c'est-à-dire les mesures de probabilités d'équilibre dans l'espace des configurations (ou *espace des phases*) du système.

1.1 La chute du déterminisme classique

La physique classique newtonienne nous enseigne qu'il est possible de déterminer l'évolution ultérieure de tout système si l'on connaît exactement les positions et vitesses de ses constituants élémentaires à un instant donné, ainsi que la totalité des forces internes ou externes au système s'exerçant à tout instant sur ces mêmes constituants (Laplace avait déjà imaginé qu'une intelligence ayant la connaissance universelle, aujourd'hui baptisée *démon de Laplace*, pourrait ainsi *voir* l'intégralité du futur). Les équations d'évolution du système s'écrivent alors :

$$m_i \frac{d^2 \vec{r}_i}{dt^2} = \vec{F}_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{v}_1, \dots, \vec{v}_N)$$

avec

$$\begin{cases} (\vec{r}_1(t_0), \dots, \vec{r}_N(t_0)) = (\vec{r}_1^0, \dots, \vec{r}_N^0) \\ (\vec{v}_1(t_0), \dots, \vec{v}_N(t_0)) = (\vec{v}_1^0, \dots, \vec{v}_N^0) \end{cases} \quad (1.1)$$

Dans la formulation lagrangienne et hamiltonienne de la physique, la vitesse \vec{v} est remplacée comme inconnue par le moment conjugué de Lagrange, l'impulsion \vec{p} . L'**état classique** du système, ou *phase*, est ainsi décrit par sa position $(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N)$ dans un espace à $6N$ dimensions appelé **espace des phases**.

En physique quantique, l'état du système est caractérisé par l'ensemble des composantes, ou *amplitudes complexes*, dans une base de vecteurs propres d'une observable. Cette dernière peut être l'observable position $(\hat{r}_1, \dots, \hat{r}_N)$. On parle alors de représentation « x », l'amplitude étant dans ce cas la fonction d'onde $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N, t)$. Elle peut être aussi l'observable impulsion représentée par l'opérateur $(\hat{p}_1, \dots, \hat{p}_N)$, auquel cas on parle de représentation « p ». L'état

est alors donné par l'amplitude $\tilde{\psi}(\vec{p}_1, \dots, \vec{p}_N, t)$, transformée de Fourier spatiale de la précédente. L'observable peut être également l'énergie dont l'opérateur est l'hamiltonien \hat{H} du système (la base étant alors formée des états stationnaires). Dans tous les cas, quelle que soit la représentation, si l'on connaît l'état complet du système à un instant t_0 , alors l'état du système à n'importe quel temps ultérieur est complètement déterminé par l'équation de Schrödinger :

$$\hat{H}|\psi\rangle = i\hbar \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} \quad \text{avec} \quad |\psi(t_0)\rangle = |\psi^0\rangle \quad . \quad (1.2)$$

L'évolution est donc déterministe, le caractère probabiliste de la mécanique quantique n'intervenant que lorsqu'on effectue une mesure, c'est-à-dire lorsqu'on fait interagir le système avec un observateur externe. On pourrait parler dans ce cas d'un *déterminisme probabiliste* car là, c'est la loi de probabilité qui évolue de façon déterministe.

Pourtant, nous allons voir qu'il est impossible d'utiliser ce déterminisme théorique pour prédire en pratique l'évolution d'un système macroscopique, et ceci pour une double raison. Tout d'abord, il serait impossible de stocker et de traiter la quantité d'informations décrivant l'ensemble des positions et impulsions d'un système macroscopique typique. Par ailleurs, même dans l'hypothèse où l'on pourrait manipuler cette quantité de données, la théorie des systèmes dynamiques nous enseigne que ce type de schéma déterministe développe une très grande *sensibilité aux conditions initiales*, qui rend caduque toute prédiction de l'état complet du système à long terme.

1.1.1 Quelques ordres de grandeur

Considérons un échantillon de matière macroscopique, tel qu'on en manipule tous les jours. L'ordre de grandeur du nombre d'atomes d'un tel système est le nombre d'Avogadro, soit $N_A \approx 6,02 \cdot 10^{23}$. Prenons 10^{24} pour simplifier. En fait, les atomes ne sont pas les constituants élémentaires, car ils sont eux-mêmes composés d'électrons, de neutrons ou de protons (ces derniers étant également des assemblages de quarks). Nous allons cependant pouvoir considérer ici ces atomes comme élémentaires, sans que ceci n'altère notre argumentation.

Il faut donc, dans une description classique, 6 paramètres réels par atome pour encoder l'état classique de notre système à n'importe quel instant (3 positions et 3 impulsions suivant les trois axes). Supposons que chaque réel soit encodé sur 32 bits, ce qui est la norme sur les ordinateurs actuels (on voit là que la précision de la mesure est également limitée par la précision du stockage de l'information). La quantité d'informations I requise pour stocker l'état initial de notre système est donc en définitive :

$$I = 10^{24} \times 6 \times 32 \text{ bits} = 24 \cdot 10^{24} \text{ octets} = 2,4 \cdot 10^{13} \text{ teraoctets}$$

En résumé, le simple stockage de l'état initial d'un système macroscopique courant demanderait $2,4 \cdot 10^{13}$ teraoctets, soit environ 3 000 teraoctets par habitant de la planète! Bien évidemment, on ne se soucie pas ici de savoir de quelle manière il serait possible de collecter de façon instantanée l'intégralité de ces données.

À supposer néanmoins que l'on y parvienne, ceci ne permettrait de stocker que l'état du système à un instant donné. Or, à l'échelle atomique et moléculaire, les temps typiques d'évolution sont couramment compris entre la picoseconde (10^{-12} s) et la nanoseconde (10^{-9} s), et même plus rapides si on s'intéresse aux processus intra-atomiques. En d'autres termes, il faudrait multiplier la capacité de stockage précédemment calculée par un facteur de l'ordre de 10^{12} pour pouvoir stocker l'évolution d'un système macroscopique sur une durée de quelques secondes. Cette simple évaluation permet de saisir immédiatement l'impossibilité matérielle qu'il y a à espérer suivre à la lettre la prescription de la mécanique newtonienne pour déterminer le comportement des systèmes à grand nombre de constituants (ou de degrés de liberté).

1.1.2 Notions sur les systèmes dynamiques

Si la résolution complète du problème à deux corps a rapidement été obtenue en mécanique newtonienne, le problème à trois corps, et plus généralement à N corps, a longtemps découragé les efforts des scientifiques. S'intéressant à la stabilité du système Terre-Lune-Soleil, Henri Poincaré, l'un des plus grands mathématiciens et physiciens français, publie en 1890 un mémoire intitulé *Sur le problème des trois corps et les équations de la dynamique*, qui ouvre la voie à la théorie des systèmes dynamiques, à la vision probabilisée de leur évolution et plus tard à la théorie du chaos. En 1896, dans *Calcul des probabilités*, il introduit la notion générale de **sensibilité aux conditions initiales**, également décrite à la même époque par Liapounov en Russie :

« ...il peut arriver que de petites différences dans les conditions initiales en engendrent de très grandes dans les phénomènes finaux ; une petite erreur sur les premières produirait une erreur énorme sur les derniers. La prédiction devient impossible et nous avons le phénomène fortuit. »

Henri Poincaré, *Calcul des probabilités*, 1896

Il faudra attendre plus de cinquante ans pour que l'on réalise que cette propriété peut également s'appliquer à des systèmes beaucoup plus simples. Dans les années 1950, Edward Lorenz, mathématicien et météorologue américain, s'intéresse aux modèles numériques de prédiction météorologique de l'époque, et découvre une instabilité profondément cachée en leur sein. Après réduction et simplification, il publie en 1963 dans le *Journal of the Atmospheric Sciences* un article intitulé « Deterministic Nonperiodic Flow ». Il y décrit un système

très simple, formé de trois degrés de liberté scalaires (trois inconnues réelles x, y, z), gouverné par un groupe de trois équations dynamiques non linéaires (c'est-à-dire reliant les dérivées temporelles à des fonctions non linéaires de ces mêmes inconnues). Ce système d'équations dépend de trois paramètres σ, r, b :

$$\begin{cases} \dot{x} = \sigma(y - x) \\ \dot{y} = rx - y - xz \\ \dot{z} = xy - bz \end{cases} . \quad (1.3)$$

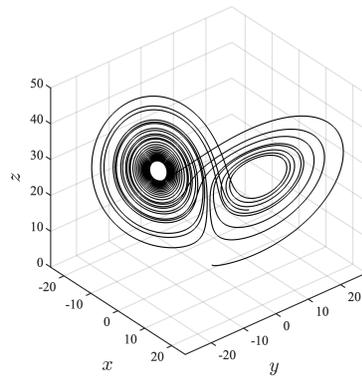


FIGURE 1.1 – À gauche, Edward Norton Lorenz (1917-2008). À droite, une représentation de l'évolution du système dynamique à trois variables couplées proposé par Lorenz (voir équation (1.3)). Il présente une très grande sensibilité aux conditions initiales, avec une infinité de trajectoires périodiques entremêlées de façon dense dans l'espace des phases, entre lesquelles viennent s'intercaler des trajectoires apériodiques.

Étonnamment pour un système aussi simple, Lorenz démontre que, pour des valeurs bien choisies des paramètres ($\sigma = 10, r = 28, b = 8/3$), les trajectoires d'évolution issues de deux états (x_1, y_1, z_1) et (x_2, y_2, z_2) initialement proches finissent par diverger très fortement au cours du temps. De fait, la séparation des solutions est *exponentielle* en temps, indépendamment de l'écart entre les conditions initiales, de telle sorte que les états des deux systèmes se retrouvent quasiment totalement décorrélés en un temps caractéristique fini. Il est donc impossible de prévoir la position du système à tout temps lointain avec une marge d'erreur raisonnable, à moins de connaître l'état initial avec une précision infinie. Par ailleurs, la plupart des trajectoires dans l'espace des phases ne sont plus périodiques mais se concentrent autour d'un ensemble de solutions quasi-périodiques qui constituent une sous-partie de l'espace des phases, formant

ce que l'on appelle un *attracteur* (figure 1.1, droite). De tels systèmes sont dits *chaotiques*, et le phénomène porte plus généralement le nom de *chaos déterministe*. La découverte de ce phénomène et l'étude numérique extensive de ces systèmes n'auront été rendues possibles qu'avec l'avènement des ordinateurs dans les années 1960.

La divergence exponentielle qui s'opère à partir de conditions initiales très proches peut n'apparaître que relativement lentement. Ainsi, des travaux relativement récents ont montré que le système solaire présenterait ce type de sensibilité, mais sur une durée de l'ordre de plusieurs centaines de millions d'années¹. Pour des temps plus courts, le système solaire apparaît « intégrable », quasi-périodique et prévisible. Pour les systèmes macroscopiques courants en revanche, cette divergence exponentielle est extrêmement rapide. Le déterminisme classique de la mécanique newtonienne, tout comme le déterminisme statistique de la mécanique quantique, s'effondrent alors et même les systèmes les plus simples échappent à la prédiction.

Dans le cas du système atmosphérique, cette dépendance a été popularisée sous le nom d'*effet papillon*, en référence à la question posée par Lorenz en 1972 lors d'une conférence : « *Un battement d'aile de papillon au Brésil peut-il déclencher une tornade au Texas ?* ». Bien évidemment, aucun papillon ne déclenche de façon générale de tornade, mais cette image caractérise assez bien notre absence de contrôle sur le système au-delà d'un certain horizon temporel, et l'impossibilité qu'il y a à prévoir son évolution future à travers une approche déterministe classique, brutale et simpliste.

1.1.3 Le théorème de Liouville

Même si le déterminisme apparent y est battu en brèche par des effets chaotiques, ces systèmes n'en conservent pas moins quelques propriétés qui permettent d'envisager un nouveau type d'approche. Tout d'abord, les systèmes isolés conservent leur énergie. Leur trajectoire ne visite donc pas l'intégralité de l'espace des phases, mais seulement une sous-partie restreinte (une variété de codimension 1) à l'intérieur de laquelle l'énergie est constante. Par ailleurs, tous les systèmes hamiltoniens vérifient le **théorème de Liouville**. Ce théorème démontre que l'on peut concevoir une distribution de systèmes gouvernés par les équations de Hamilton (autrement dit, une mesure de probabilités sur l'espace des phases) comme un échantillonnage réparti au sein d'un fluide incompressible. Dans cette image, l'évolution au cours du temps d'une mesure de probabilité sur l'espace des phases s'apparente à l'écoulement de ce même fluide incompressible. Ce théorème est le socle intellectuel qui justifie l'utili-

1. J. Laskar, "The chaotic motion of the solar system – a numerical estimate of the size of the chaotic zones," *Icarus*, 1990 **88**(2) :266–291.

sation des probabilités (ou des mesures sur l'espace des phases) comme l'outil mathématique adapté à la description des grands systèmes.

Pour démontrer le théorème de Liouville, on considère un élément de volume dV de l'espace des phases d'un système à N particules. Ce volume élémentaire s'écrit :

$$dV = \prod_{i=1}^N (dx_i dy_i dz_i) \times (dp_{x,i} dp_{y,i} dp_{z,i}) \quad . \quad (1.4)$$

Pour simplifier les notations, nous allons utiliser un seul indice i pour regrouper les numérotations des particules et des dimensions spatiales (x, y, z) : les coordonnées spatiales sont désormais notées $(q_i)_{1 \leq i \leq 3N}$ et les impulsions $(p_i)_{1 \leq i \leq 3N}$, l'impulsion p_i étant le moment conjugué de Lagrange associé à q_i . L'élément de volume s'écrit alors :

$$dV = \prod_{i=1}^{3N} dq_i dp_i \quad . \quad (1.5)$$

Si le système considéré évolue suivant une dynamique hamiltonienne, alors les coordonnées (q_i, p_i) obéissent aux équations d'Hamilton-Jacobi :

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad \text{et} \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad . \quad (1.6)$$

Calculons dans ce cas l'évolution du volume dV au cours d'un intervalle de temps dt entre t et $t + dt$, ou plutôt l'évolution de son logarithme :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \ln(dV) &= \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^{3N} \ln(dq_i) + \ln(dp_i) \right) \\ &= \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{1}{dq_i} \frac{d(dq_i)}{dt} + \frac{1}{dp_i} \frac{d(dp_i)}{dt} \right) \quad . \end{aligned} \quad (1.7)$$

On utilise les équations de Hamilton-Jacobi (1.6) pour évaluer les dérivées temporelles, d'où :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \ln(dV) &= \sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{1}{dq_i} d \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{1}{dp_i} d \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) \\ &= d \left[\sum_{i=1}^{3N} \left(\frac{\partial^2 H}{\partial q_i \partial p_i} - \frac{\partial^2 H}{\partial p_i \partial q_i} \right) \right] = 0 \quad . \end{aligned} \quad (1.8)$$

La taille d'un volume de l'espace des phases reste donc bien constante au cours de son évolution hamiltonienne. Une distribution initiale qui évoluerait suivant

cette dynamique pourrait donc être assimilée à la densité d'un fluide incompressible. En d'autres termes, l'ensemble des lignes d'évolution d'un système hamiltonien dans l'espace des phases à $6N$ dimensions peut se comprendre comme les lignes de courant de ce fluide incompressible : on parle alors d'**écoulement hamiltonien**.

1.2 La refondation probabiliste

Devant l'impossibilité de connaître avec précision l'état microscopique complet d'un système (que l'on désignera par le terme de **micro-état**), de stocker les données permettant de représenter ce micro-état, de manipuler ces données pour calculer l'évolution du système, et enfin de contrôler l'erreur commise sur la prédiction en raison de la grande sensibilité aux conditions initiales, il faut se résoudre à se tourner vers une description probabiliste. C'est James Clerk Maxwell et Ludwig Boltzmann qui introduisent les premiers les probabilités dans la description d'un système physique, avec la *théorie cinétique des gaz*. Boltzmann y postule l'hypothèse du *chaos moléculaire* : les vitesses de deux particules qui entrent en collision sont *a priori* non corrélées et indépendantes de leur position. Cette absence de corrélation traduit à la fois l'abandon du déterminisme classique et la simplification du calcul dans l'approche probabiliste.

De cette approche probabiliste va émerger également la notion d'évolution irréversible du système macroscopique, et l'introduction d'une variable qui quantifie cette irréversibilité, l'*entropie*. La description probabiliste de la physique statistique sera complètement formalisée par Josiah Willard Gibbs dans sa version classique. La physique statistique quantique sera formulée quelques années plus tard, avec les contributions essentielles de Max Planck, d'Albert Einstein, d'Enrico Fermi, de Wolfgang Pauli, de Satyendranath Bose et de Paul Dirac. C'est cet édifice théorique que nous allons nous attacher à décrire dans cet ouvrage.

À retenir de ce chapitre

- Les échelles de taille et de temps rendent impossible la résolution des équations de la dynamique newtonienne pour des systèmes macroscopiques courants.
- L'évolution d'un système hamiltonien se traduit par une trajectoire déterministe dans l'espace des phases : la position initiale du système dans cet espace détermine complètement son évolution future. L'existence du *chaos déterministe* rend cependant la prédiction impossible au delà d'une échelle de temps finie pour des systèmes possédant plus de trois degrés de liberté. Il faut alors recourir à une description probabiliste des systèmes physiques.
- La connaissance du système passe par des propriétés fondamentales, telle la conservation de l'énergie pour les systèmes isolés. En particulier, pour les systèmes hamiltoniens, l'ensemble des trajectoires possibles dans l'espace des phases peut être vu comme un écoulement incompressible qui conserve les volumes : c'est le *théorème de Liouville*.
- Cette propriété indique la possibilité d'attribuer une probabilité de présence à chacun des volumes élémentaires dans cet espace, et suggère de s'intéresser à l'évolution de cette distribution de probabilité.