

Christophe Texier, Guillaume Roux

Physique statistique

Des processus élémentaires
aux phénomènes collectifs

2^e ÉDITION

DUNOD

Illustration de couverture : Simulation du modèle d'Ising pour un gradient de température. Sur la droite de la figure, la température est plus élevée et le système est dans la phase paramagnétique. Sur la gauche, la température est plus basse et de larges domaines d'aimantation uniforme se forment (vers la phase ferromagnétique). Image générée avec une variante du code de l'exercice 14.8 de l'ouvrage.

Table des matières

Avant-propos	X
--------------	---

Notations	XII
-----------	-----

Partie 1

Fondements

Chapitre 1 Le périmètre de la physique statistique	1
--	---

1. Introduction	1
2. Existence d'une échelle atomique	2
3. Une théorie fondamentale au statut particulier	2
4. Émergentisme	4

Chapitre 2 Probabilités	7
-------------------------	---

1. Nécessité de l'approche probabiliste	7
2. Probabilités et variables aléatoires	9
3. Moyenne, variance, moments, cumulants, corrélations,...	14
4. Quelques exemples de distributions	20
5. Théorème de la limite centrale	21

Annexe A. Remarques supplémentaires sur les fonctions génératrices et les cumulants	25
---	----

Annexe B. Fluctuations typiques vs grandes déviations	27
---	----

Exercices	33
-----------	----

Chapitre 3 Ergodicité	34
-----------------------	----

1. Équilibre macroscopique et ergodicité	34
2. Microétats (états purs)	38
3. Macroétats (mélanges statistiques)	40
4. Le dénombrement des microétats : densité d'états	42

Annexe A. Formulation classique	51
Annexe B. Formulation quantique	53
Exercices	57
Chapitre 4 Entropie	58
1. L'entropie en thermodynamique	58
2. Information et entropie statistique	60
Annexe A. La méthode des multiplicateurs de Lagrange	68
Exercices	70
Chapitre 5 Systèmes isolés à l'équilibre – Postulat fondamental	71
1. Recherche du postulat fondamental	71
2. Postulat fondamental de la physique statistique	74
3. Relâchement de contraintes	80
4. Irréversibilité	94
Exercices et Problèmes	98
Pb 5.1 : Extensivité et dilatations	99
Pb 5.2 : Gaz parfaits quantiques sur réseaux	100
Pb 5.3 : Force de déplétion	101
Chapitre 6 Systèmes non isolés – Ensembles canonique et grand-canonique	103
1. Ensemble canonique	104
2. Ensemble grand canonique	117
3. Relâchement des contraintes (cas canonique)	124
Annexe A. Travaux élémentaires, forces généralisées et variables conjuguées	128
Annexe B. Mouvements de rotation, moment cinétique et dipôles permanents en champs externes	130
Exercices et Problèmes	135
Pb 6.1 : Équilibre chimique et loi d'action de masse	136

Chapitre 7	Vue d'ensemble des outils de la physique statistique	137
1.	L'équivalence des ensembles	137
2.	Transformations thermodynamiques	142
3.	La physique statistique : mode d'emploi	144
Annexe A.	Potentiels thermodynamiques	148
Annexe B.	Transformation de Legendre : l'exemple des partitions d'un entier	150
	Exercices et Problèmes	153
Pb 7.1 :	Équivalence des ensembles (moyennes) mais inéquivalence des fluctuations	154
Pb 7.2 :	Ensemble isotherme-isobare	155
Pb 7.3 :	Gaz 1D de particules en interaction	155

Partie 2

Applications

Chapitre 8	Description classique des gaz	157
1.	Gaz parfait monoatomique	157
2.	Densité spatiale et distribution des vitesses	159
3.	Capacité calorifique des gaz parfaits moléculaires	161
4.	Rôle des interactions dans les gaz	170
Annexe A.	Molécules diatomiques homonucléaires (H_2). Rôle de l'équilibration	180
	Exercices	182
Chapitre 9	Thermodynamique des oscillateurs harmoniques	184
1.	Oscillateur harmonique quantique unidimensionnel	185
2.	Vibrations d'un corps solide	187
3.	Thermodynamique du rayonnement	196

Annexe A. Modes propres d'une chaîne de ressorts	204
Exercices et Problèmes	205
Pb 9.1 : Mesure de k_B (expérience de Kappler)	205

Chapitre 10 Transitions de phase	207
1. Transition liquide-gaz	208
2. Transition paramagnétique-ferromagnétique	217
3. Universalité	232
Exercices	236

Partie 3

Gaz quantiques

Chapitre 11 Statistiques quantiques	238
1. Particules indiscernables : fermions et bosons	238
2. Les statistiques de Fermi-Dirac et Bose-Einstein	246
Annexe A. Fermions de spin 1/2	253
Exercices et Problèmes	255
Pb 11.1 : Bosons (ou fermions) dans un puits harmonique 1D	255
Pb 11.2 : 2nd coefficient du viriel des gaz parfaits quantiques	256

Chapitre 12 Fermions	258
1. Introduction	258
2. Gaz parfait dégénéré de fermions libres à $T = 0$	262
3. Comportement à basse température	265
Exercices et Problèmes	271
Pb 12.1 : Métal et semimétal en 2D	271
Pb 12.2 : Magnétisme d'un gaz d'électrons bidimensionnel	273
Pb 12.3 : Ferromagnétisme itinérant et instabilité de Stoner	274

Chapitre 13 Bosons	276
1. Introduction	276
2. Le gaz parfait de bosons libres	279
3. Bosons dans un piège harmonique	288
Exercices et Problèmes	295
Pb 13.1 : Loi de Bloch (ferromagnétisme)	296
Pb 13.2 : Fluctuations dans un condensat de Bose-Einstein	297
 Partie 4	
 Chapitre 14 Physique statistique hors équilibre	298
1. Transport diffusif	298
2. Éléments de théorie cinétique	304
3. L'équation de Langevin	309
4. Équation maîtresse	312
5. Chaînes de Markov	316
Exercices et Problèmes	324
Pb 14.1 : Transport dans les conducteurs électriques	325
 Formulaire	327
Solutions des exercices et problèmes	331
Bibliographie	397
Index	399

Avant-propos

Cet ouvrage propose un cours d'introduction à la physique statistique pour les étudiants de premier et deuxième cycles universitaires. Il est le fruit de plusieurs années d'un enseignement dispensé à l'Université Paris-Sud à travers le cours magistral et des séances de travaux dirigés. Le cœur du texte est basé sur des notes de cours rédigées par l'un d'entre nous dans les années 2011-2012, qui ont été profondément remaniées et complétées, notamment par de nombreux exercices et problèmes dont la plupart ont été posés en examen. L'ouvrage a été conçu pour être utilisé de façon autonome et ne requiert que des notions élémentaires de mécanique classique et de mécanique quantique (de niveau L3). Il a été écrit avec le souci de rester assez compact, proche des réalités d'un enseignement pratique, et dans cette optique, a été divisé en trois parties, « Fondements », « Applications » et « Gaz quantiques », que nous allons maintenant présenter.

La première partie s'ouvre sur quelques pages d'introduction (chapitre 1) dans lesquelles nous définirons notre objet d'étude et essayerons de dégager quelques idées directrices. En particulier, nous insisterons sur le statut très particulier de la physique statistique en tant que grande théorie fondamentale, puisque son objet n'est pas de décrire la dynamique à l'échelle élémentaire, mais de permettre de comprendre comment les phénomènes collectifs émergent. Le chapitre 2 introduit quelques notions de théorie des probabilités nécessaires à notre présentation, i.e. le « langage » sur lequel est basée la physique statistique. Le chapitre 3 est un chapitre de transition qui expose comment le langage probabiliste sera appliqué dans le cadre des modèles physiques et introduit le jargon propre à la physique statistique. Nous introduirons également un outil qui jouera un rôle très important par la suite : la densité d'états. Le concept d'entropie, dont nous mentionnerons les différentes interprétations au chapitre 4, sera central pour la suite. Le chapitre 5, qui introduit le postulat fondamental, correspond au cœur de la physique statistique. Si son application directe concerne l'étude des systèmes isolés et à l'équilibre (« ensemble microcanonique »), nous expliquerons au chapitre 6 comment étudier le cas des systèmes non-isolés, en contact avec un réservoir, d'énergie et/ou de particules (« ensembles canonique et grand canonique »). Le cas des systèmes en contact avec un réservoir de volume (« ensemble isotherme-isobare ») sera discuté dans un problème. Le chapitre 7 qui clôt la première partie donnera une vue d'ensemble pour insister sur la logique globale.

Si la première partie illustre la construction et l'articulation des outils à travers les exemples les plus simples, la seconde partie « Applications » propose de les appliquer dans des cas réalistes, centrés sur l'interprétation des observations expérimentales. Trois sujets importants seront discutés : tout d'abord la théorie semiclassical des gaz (chapitre 8). Nous discuterons ensuite la thermodynamique des ensembles d'oscillateurs harmoniques (chapitre 9) à travers deux applications : les vibrations des atomes d'un réseau cristallin, puis la thermodynamique du rayonnement, un sujet d'importance historiquement puisqu'il initie l'émergence des idées quantiques, avec la loi de Planck en

1900. Pour clore cette seconde partie (chapitre 10), nous verrons comment des interactions sont responsables des phénomènes collectifs extrêmement spectaculaires que sont les transitions de phase.

La troisième partie traite du rôle des corrélations quantiques, qui se manifestent dans le régime de « basse » température. Le chapitre 11 montrera comment l'ensemble grand canonique permet de traiter efficacement les problèmes d'indiscernabilité posés par la mécanique quantique. Les deux derniers chapitres appliqueront ces concepts aux deux types de particules existant, fermions (chapitres 12) et bosons (chapitre 13). Si l'observation des effets quantiques dans les gaz bosoniques requiert des conditions extrêmes ($T \lesssim$ quelques K), nous verrons que le comportement des électrons (des fermions) dans un métal à température ambiante est dominé par le principe de Pauli.

L'élaboration de ce cours a bénéficié très largement de notre environnement scientifique. D'abord au sein des équipes enseignantes : nous remercions chaleureusement Christian Boulet qui a dirigé l'équipe « physique statistique » au magistère d'Orsay jusqu'en 2011, ainsi que tous les collègues avec qui nous avons eu le plaisir d'y travailler : Meydi Ferrier, Giuseppe Foffi, Jean-Noël Fuchs, Henk Hilhorst, Roland Mastrisolitto, Nicolas Pavloff, Alberto Rosso (qui y a enseigné bénévolement) et Bartjan van Tent. Nous remercions les étudiants du magistère à qui nous avons eu le plaisir de dispenser cet enseignement : plusieurs années de fructueux échanges ont fortement participé à façonner ce cours. Nous sommes particulièrement reconnaissants envers plusieurs collègues qui ont apporté des contributions assez directes : Alberto Rosso (pour les programmes python produisant les simulations du problème de Sinai, cf. les figures. 5.2 et 5.3), Giuseppe Foffi (qui a inspiré le problème 5.3), Emmanuel Trizac (l'exercice 10.8 sur la méthode variationnelle est basé sur un de ses articles), Jean-Noël Fuchs (qui avait rédigé une autre version du problème 12.1 sur le graphène) et Gilles Montambaux (le problème 11.2 a été imaginé comme application de la jolie relation (11.43) qu'il avait pointée). Être membres d'un laboratoire de recherche en physique statistique a certainement été un atout pour écrire ce livre, et nous avons bénéficié des conseils et remarques de plusieurs collègues que nous souhaitons remercier particulièrement : Eugène Bogomolny, Alain Comtet, Silvio Franz, Olivier Giraud, Hubert Krivine, Thierry Jolicœur, Martin Lenz, Satya Majumdar, Marc Mézard, Gilles Montambaux, Nicolas Pavloff, Alberto Rosso, Raoul Santachiara, Grégory Schehr, Emmanuel Trizac (qui aura la grande surprise d'être cité dans un livre de physique statistique pour ses travaux photographiques, cf. page 63 !) et Denis Ullmo.

Au moment de clôturer ce projet, je souhaite (CT) exprimer ma gratitude aux trois professeurs exceptionnels, Bernard Diu, Alain Laverne et Bernard Roulet, qui m'ont enseigné les bases de cette théorie fondamentale fascinante.

Enfin, nous remercions Laetitia Jammet et Vanessa Beunèche pour leur patience et leur travail.

Orsay, le 23 janvier 2017.

Seconde édition

Après la publication de la première édition, nous avons continué tous deux à enseigner la physique statistique, ce qui nous a suggéré d’aborder de nouveaux sujets et d’introduire d’autres approches ainsi que de nouveaux exercices. Nous avons eu rapidement le désir de faire évoluer le livre (et d’en profiter pour corriger quelques coquilles et clarifier plusieurs points), souhait entré en résonance avec celui de notre editrice Laetitia Jammet, que nous remercions. Pour terminer nous adressons un grand remerciement à tous les étudiants et étudiantes du magistère de physique d’Orsay, public sympathique et stimulant.

Orsay, le 22 avril 2024.

Notations

$\stackrel{\text{def}}{=}$	égal par définition	dW	quantité infinitésimale de travail
$\approx$ ou $\simeq$	approximativement égal à	dQ	quantité infinitésimale de chaleur
$\sim$	de l’ordre de	$\rho(E)$	densité d’états
$\propto$	proportionnel à	$\Phi(E)$	densité d’états intégrée
$\forall$	quel que soit	$\Omega(E)$	nombre de microétats accessibles
$\mathbb{N}$	ens. des entiers naturels	S^*	entropie microcanonique
$\mathbb{Z}$	ens. des nombres relatifs	T^*	température microcanonique
$\mathbb{R}$	ens. des nombres réels	p^*	pression microcanonique
$\mathbb{C}$	ens. des nombres complexes	μ^*	potentiel chimique microcanonique
$\delta_{i,j}$	symbole de Kronecker	Z	fonction de partition canonique
$\delta(x)$	distribution de Dirac	F	énergie libre
$\theta_H(x)$	fonction de Heaviside	$\overline{E}^c$	moyenne canonique de l’énergie
$\text{Tr}\{\dots\}$	trace	p^c	pression canonique
$\otimes$	produit tensoriel	S^c	entropie canonique
$\langle X \rangle$	moyenne de X	μ^c	potentiel chimique canonique
$\text{Var}(X)$	variance ($= \langle X^2 \rangle - \langle X \rangle^2$)	Ξ	fonction de partition grand canonique
σ_X	écart-type ($= \sqrt{\text{Var}(X)}$)	ξ_λ	fonction de grand partition pour l’état individuel λ
		J	grand potentiel
H	Hamiltonien	$\overline{N}^g$	moyenne grand canonique du nombre de particules
s	spin d’une particule	$\overline{E}^g$	moyenne grand canonique de l’énergie
γ	facteur gyromagnétique	p^g	pression grand canonique
		μ^g	potentiel chimique grand canonique
		S^g	entropie grand canonique

Constantes fondamentales

constante de Planck	$h = 6,63 \times 10^{-34} \text{ J.s}$ et $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,05 \times 10^{-34} \text{ J.s}$
constante de Boltzmann	$k_B = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$
nombre d’Avogadro	$\mathcal{N}_A = 6,02 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
constante des gaz parfaits	$R = 8,31 \text{ J.mol}^{-1}.\text{K}^{-1}$
vitesse de la lumière	$c = 3,00 \times 10^8 \text{ m.s}^{-1}$
charge élémentaire	$q_e = -1,60 \times 10^{-19} \text{ C}$
masse de l’électron	$m_e = 0,91 \times 10^{-30} \text{ kg}$
masse du proton	$m_p = 1,67 \times 10^{-27} \text{ kg}$
magnéton de Bohr	$\mu_B = \frac{\hbar q_e }{2m_e} = 0,93 \times 10^{-23} \text{ J.T}^{-1}$

Le périmètre de la physique statistique

Objectifs

Définir à quoi sert la physique statistique.

Identifier la place de la physique statistique parmi les théories de la physique.

Plan

- 1 Introduction
- 2 Existence d'une échelle atomique
- 3 Une théorie fondamentale au statut particulier
- 4 Émergentisme

1 Introduction

Parmi les grandes théories fondamentales de la physique, la physique statistique est certainement l'une des plus importantes, puisqu'avec la mécanique quantique, elles forment le socle de la physique moderne. Elle a été fondée (dans sa version classique) pendant la seconde moitié du XIX^e siècle par Clausius, Maxwell, Boltzmann et Gibbs, puis fertilisée par le développement de la mécanique quantique au cours de la première moitié du XX^e siècle. Elle s'attelle à l'étude des systèmes à très grand nombre de degrés de liberté (typiquement le nombre d'Avogadro $\mathcal{N}_A \sim 10^{23}$ pour les corps matériels aux échelles macroscopiques).

Elle a des applications dans quasiment tous les domaines de la physique : matière diluée (gaz atomiques et moléculaires), matière condensée (solides, liquides, magnétisme, polymères, cristaux liquides, etc), thermo-chimie, biophysique, physique des plasmas, astrophysique, etc. Depuis sa fondation, elle a continué à voir son champ d'application s'élargir, pour déborder aujourd'hui très largement le champ de la physique : certains physiciens et physiciennes s'intéressent à des sujets tels que les réseaux (réseaux de communication, réseaux de neurones), des problèmes d'informatique théorique (optimisation combinatoire, satisfaisabilité de contraintes, etc) ou étudient même des modèles socio-économiques (réseaux sociaux, propagation d'épidémies, modèles de vote, étude des marchés financiers, etc). Pour reprendre le titre d'un paragraphe de l'ouvrage de Roger Balian [4], elle permet une certaine forme d'*unification des sciences macroscopiques*.

L'objet de ce chapitre introductif sera de continuer à cerner notre sujet d'étude et mieux situer la place de la physique statistique.

2 Existence d'une échelle atomique

Dans notre perception courante nous sommes essentiellement confrontés à des solides, des liquides, des gaz, différentes organisations de la matière (des « phases ») qui présentent un caractère *continu*. Cependant, nous savons aujourd'hui qu'il existe une échelle « atomique » en deçà de laquelle émerge le caractère *discret* de la matière. Au XIX^e siècle, la physique statistique a cherché, par le développement de la théorie cinétique des gaz (Clausius, Maxwell, Boltzmann, etc), à fonder la thermodynamique sur « l'hypothèse atomique ». Cette hypothèse a des racines qui remontent à l'antiquité : on peut mentionner les deux atomistes célèbres, Démocrite (~ 460–370 av JC) qui semble avoir introduit la notion d'atome (« *ατομος* » pour « indivisible ») et Lucrèce (~ 95–55 av JC), célèbre pour son ouvrage *De rerum natura*. Bien que les développements de la chimie au XIX^e siècle en fournissent de précieux indices, avec la loi des proportions définies, l'hypothèse atomique a rencontré une incroyable résistance dans la communauté des physiciens à la fin du XIX^e siècle, dont une partie étaient en faveur d'une description purement continue. Ce n'est qu'à l'orée du XX^e siècle que l'hypothèse atomique fut validée définitivement par Jean Perrin (en 1908) grâce à son analyse du mouvement brownien (cf. figure 2.2). Il est intéressant de chercher à comprendre la raison de la résistance d'une partie des physiciens du XIX^e siècle à la physique statistique : tout d'abord, les preuves expérimentales de l'existence des atomes ne sont venues qu'au début du XX^e, mais plus profondément, l'idée que la description la plus fondamentale (la physique statistique) repose sur une formulation de nature probabiliste était inacceptable (d'un point de vue philosophique) pour de nombreux scientifiques.

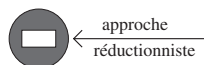
Si la physique statistique est justifiée par l'existence d'une « échelle atomique », nous devons toutefois prendre garde à ne pas prendre trop littéralement la distinction entre « microscopique (atomique) » et « macroscopique ». La diversité des exemples d'applications nous conduit à préciser cette opposition qui doit plutôt être comprise entre des *processus élémentaires* et des *phénomènes collectifs*.

3 Une théorie fondamentale au statut particulier

3.1 Réductionnisme

Une logique qui a prévalu dans le développement de la physique moderne (depuis le XVII^e siècle) est la logique réductionniste. Celle-ci procède par une approche *top-down* (descendante) visant à obtenir une description de plus en plus fine de la matière et une formulation de lois physiques au niveau de plus en plus élémentaire :

homme → cellule → atome → noyau → particules élémentaires → ?



Si le développement ultime (au moins celui validé expérimentalement) est le modèle standard pour les trois interactions fondamentales (électro-faible et forte), il faut comprendre que la connaissance des lois qui régissent la dynamique au niveau le plus *élémentaire* ne donne aucune clé sur la complexité observée en remontant des petites aux grandes échelles. Nous comprenons aujourd'hui que l'idée que tout serait contenu dans les lois ultimes décrivant la dynamique aux échelles les plus élémentaires est profondément erronée :¹

Élémentaire $\neq$ Fondamental

Par exemple, pour le cas d'un système simple comme un gaz, essayons de comprendre pourquoi la mécanique newtonienne décrivant le mouvement des atomes à l'échelle élémentaire échoue à expliquer les comportements du gaz à l'échelle macroscopique. Le point n'est pas que la mécanique newtonienne serait incorrecte, mais seulement qu'elle devient *inefficace* dès que le nombre de degrés de liberté devient trop grand. Dès que la dynamique est un tant soit peu complexe, ce qui peut se manifester déjà pour quelques degrés de liberté (et donc *a fortiori* pour $\sim 10^{23}$), à cause des phénomènes *chaotiques*, la mécanique classique perd tout caractère prédictif. Elle ne fournit *pas le bon langage* pour analyser de tels problèmes. De même que la validité de la mécanique newtonienne est limitée en allant vers les hautes énergies (mécanique newtonienne $\rightarrow$ relativité restreinte) et/ou les petites échelles (mécanique newtonienne $\rightarrow$ mécanique quantique), une autre limitation vient du cas des systèmes plus *complexes* (mécanique newtonienne $\rightarrow$ mécanique statistique).

3.2 Du microscopique au macroscopique

La physique statistique occupe une place à part parmi les grandes théories fondamentales que sont la mécanique classique, l'électromagnétisme, la théorie de la relativité et la mécanique quantique. Si les objets d'étude de ces dernières sont plus ou moins distincts, toutes ces théories « cadres » présentent la même structure : au cœur de la théorie quelques règles très simples, ou *postulats*, gouvernant la dynamique élémentaire, comme les lois de Newton, les équations de Maxwell, le principe d'équivalence, ou encore les postulats de la mécanique quantique. Tout l'art du physicien est ensuite de les mettre en musique en construisant un *modèle* décrivant la situation d'intérêt.

La physique statistique procède d'une logique assez différente puisqu'elle n'entreprend pas de mieux décrire les lois de la nature à l'échelle élémentaire. En revanche, elle fait appel aux concepts probabilistes pour jeter un pont en le microscopique et le macroscopique. Contrairement à toutes les théories sus-mentionnées, la physique statistique a donc le statut d'une « théorie *sur-couche* », requérant une autre théorie (mécanique newtonienne ou mécanique quantique ou autre) pour décrire les processus élémentaires.

1. Il faut entendre « fondamental » dans le sens de « fondation » ou « fondement ».

Par l'utilisation de méthodes probabilistes, la physique statistique permet de déduire les propriétés des systèmes aux échelles macroscopiques à partir des lois qui gouvernent les constituants élémentaires aux échelles microscopiques.

Ces quelques remarques mettent déjà en lumière un certain nombre d'oppositions entre les deux niveaux :

Microscopique	Macroscopique
• discret • petit nombres de lois simples (postulats de la MQ, équations de Maxwell,...) • comportement aléatoire • équations réversibles	• continu • diversité, complexité, grand nombre de théories effectives • déterministe • irréversibilité

Nous verrons dans l'ouvrage comment concilier ces antagonismes.

3.3 Thermodynamique et physique statistique

Si le statut de théorie « sur-couche » place la physique statistique dans une position particulière parmi les grandes théories physiques, elle n'est pas la seule puisque la *thermodynamique*, la science des conversions d'énergie, occupe une place similaire. La thermodynamique est cependant une théorie axiomatique basée sur des principes opérant directement à l'échelle macroscopique. Elle permet de construire des modèles dits *phénoménologiques* (i.e. dont les ingrédients sont basés sur l'analyse des observations expérimentales), alors que la physique statistique est beaucoup plus ambitieuse puisqu'elle propose d'expliquer les phénomènes à l'échelle macroscopique à partir de modèles dits *microscopiques*, dont les ingrédients sont dans la dynamique au niveau élémentaire. Cette dernière a donc un pouvoir prédictif potentiellement beaucoup plus important.

En outre, la physique statistique permettra de répondre à des questions plus subtiles, sur les fluctuations des observables ou leurs corrélations. C'est donc une théorie plus fondamentale, qui justifie et interprète, en particulier, la thermodynamique.

4 Émergentisme

Au lieu de suivre la voie *top-down* réductionniste, la physique statistique suit la voie *bottom-up* (ascendante). Dans sa démarche elle montre que la physique à l'échelle « macroscopique » est largement indépendante des détails de l'échelle « microscopique », il y a un découplage entre les différentes échelles. Elle démonte ainsi le mythe réductionniste et montre que **chaque échelle requiert son propre niveau d'analyse**. L'origine

du découplage entre les échelles repose sur l'existence de puissants principes d'auto-organisation à l'échelle macroscopique, ce qui explique en grande partie la disparition de l'information sur l'échelle microscopique, et l'**universalité** de nombreuses propriétés à l'échelle macroscopique [1, 27].

L'illustration la plus simple de cette idée est fournie par le théorème de la limite centrale, qui sera discuté à la fin du chapitre 2, § 5. En physique, le phénomène de *transition de phase* offre une autre illustration remarquable du concept d'émergence. Discutons par exemple un système constitué d'un nombre macroscopique d'atomes, $N \sim 10^{23}$, dans un cadre classique où ils sont décrits comme des particules ponctuelles en interaction. Au niveau élémentaire, l'interaction entre les atomes est bien décrite par une interaction à deux corps du type potentiel de Lennard-Jones : $u(r) = u_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$, où u_0 est une échelle d'énergie et r_0 la portée de l'interaction. Les ingrédients microscopiques sont donc extrêmement simples : les lois de Newton avec ce potentiel d'interaction. L'expérience (de nombreux fluides sont bien décrits dans ce cadre) nous enseigne cependant que l'étude de ce problème est extrêmement riche : le système peut présenter à l'échelle macroscopique des comportements très différents et se présenter sous différentes « *phases* », gazeuse (à faible densité), liquide ou solide. L'origine de ces différentes organisations de la matière n'est donc pas à chercher dans les détails microscopiques mais dans le passage du microscopique au macroscopique.

À l'échelle macroscopique, il y a **émergence** de phénomènes **collectifs**, imprévisibles avec la seule compréhension de la dynamique à l'échelle microscopique.

Ce courant de pensée, appelé *émergentisme*, prend donc l'exact contre-pied de l'approche réductionniste. Le projet est mené à bien par l'introduction de l'approche probabiliste, ce qui est apparu comme une révolution à la fin du XIX^e siècle. Mais il faut comprendre que c'est aussi un changement de perspective complet. Pour appréhender cela, commençons par rappeler la logique qui avait prévalu jusque là en considérant l'exemple de l'étude du mouvement des planètes dans le système solaire : parallèlement aux avancées technologiques sur les moyens d'observation, les astronomes ont progressivement *raffiné* leurs modèles, ce qui a culminé au milieu du XIX^e siècle avec la découverte de Neptune grâce aux « anomalies » observées sur la trajectoire d'Uranus. À l'inverse, le découplage entre microscopique et macroscopique dans les systèmes complexes montre que le physicien à tout intérêt à *simplifier* au maximum les modèles. La plus belle application de cette idée se trouve dans la théorie des phénomènes critiques où la détermination des exposants critiques peut être menée sur n'importe quel modèle représentant d'une certaine classe d'universalité.

Pour en savoir plus :

- Sur l'approche émergentiste, on pourra consulter le célèbre article de P. Anderson, *More is different* [1] ou le livre de R. Laughlin [27].
- L'ouvrage de R. Balian [4] contient une multitude de remarques historiques passionnantes, ainsi que celui de R. Pathria [33].
- Quelques références générales :
 - Des ouvrages assez complets : F. Reif [36], R. Pathria [33] et B. Diu, C. Guthman, D. Lederer et B. Roulet [16].
 - Un ouvrage plus difficile est celui de R. Balian [4, 5].

Objectifs

Introduire quelques notions élémentaires de théorie des probabilités.

Plan

- 1 Nécessité de l'approche probabiliste
- 2 Probabilités et variables aléatoires
- 3 Moyenne, variance, moments, cumulants, corrélations...
- 4 Quelques exemples de distributions
- 5 Théorème de la limite centrale

1 Nécessité de l'approche probabiliste

La physique statistique s'intéresse aux systèmes ayant un très grand nombre de degrés de liberté. Par exemple dans un fluide ou un corps solide dans un volume macroscopique (taille ~ 1 m), le nombre d'atomes est typiquement de l'ordre du nombre d'Avogadro

$$\mathcal{N}_A = 6.022\,140\,76 \times 10^{23} \quad (2.1)$$

qui représente le nombre de particules dans une mole. Loin de compliquer l'analyse, cette observation va se révéler être la source d'une grande simplification puisqu'elle va justifier l'utilisation de concepts probabilistes.

1.1 Une nécessité pratique

Si l'impossibilité pratique d'analyser la dynamique (classique) de tous les constituants d'un gaz était évidente à la fin du XIX^e siècle, examinons ce qu'il en est à l'heure de l'informatique. Considérons $1\text{ cm}^3 = 10^{-3}\text{ L}$ de gaz parfait monoatomique dans les conditions normales de température et de pression ($T = 300\text{ K} \simeq 27^\circ\text{C}$ et $p = 1\text{ atm} = 10^5\text{ Pa}$, soit un volume molaire de $\simeq 25\text{ L/mol}$) et cherchons à caractériser l'état microscopique du système à un instant donné, entreprise dont les fruits semblent pourtant bien modestes ! Le nombre d'atomes dans le gaz est

$$N = \frac{10^{-3}}{25} \mathcal{N}_A \simeq 2.5 \cdot 10^{20}. \quad (2.2)$$

Si l'on fait une « photo » du gaz à un instant donné, son état sera défini par la donnée des positions et des vitesses des N atomes. La mémoire nécessaire est estimée à

$$\text{Mémoire} \simeq \frac{N \ln N}{2 \ln 2} \quad \text{octets}. \quad (2.3)$$

L'application numérique donne $\approx 10^{22}$ octets, soit 10^{10} disques durs de 1 To (un TéraOctet = 1000 GigaOctet). Conclusion : si chaque être humain sur terre (environ 7×10^9 personnes) possédait un disque dur de 1 To, cela suffirait à peine à stocker l'information (de la mécanique classique) correspondant à une « photographie » du gaz contenu dans 1 cm^3 !

Exercice 2.1

Combien de chiffres significatifs sont-ils nécessaires pour repérer la position de chacun des N atomes dans le gaz ? Déduire l'expression (2.3).

Indication : 1 octet = 8 bits, i.e. un chiffre entre 0 et 255.

D'un point de vue pratique, il est exclu de chercher à prédire la dynamique de l'ensemble des constituants élémentaires d'un corps macroscopique. Non seulement l'objectif est **hors de portée** (la limite des expériences numériques de dynamique moléculaire correspond au million de particules) mais soulignons surtout qu'il n'a **pas d'intérêt**. En effet, le nombre d'informations « intéressantes » que l'on souhaite extraire est en général très faible : quelques propriétés telles la température, la pression, la densité, ou même des distributions (de la vitesse, des distances entre atomes), etc. La connaissance du nombre faramineux de données spécifiant les positions et les vitesses des particules ne nous dit pas clairement comment remonter à ces informations intéressantes.

1.2 Une nécessité de principe

D'un point de vue plus fondamental remarquons que la capacité prédictive des lois microscopiques sur l'évolution d'un système complexe est très faible pour plusieurs raisons.

- **Hasard épistémique** (lié à notre ignorance¹) : La dynamique classique d'un système à grand nombre de degrés de liberté en présence d'interaction est **chaotique**. L'absence d'intégrabilité (i.e. la faiblesse du nombre de constantes du mouvement) conduit à une *extrême sensibilité* de la dynamique dans les *conditions initiales* : des variations infimes sur l'état initial se répercutent extrêmement rapidement sur l'évolution, ce qui donne lieu à des trajectoires divergentes. De plus, il est difficile en pratique de définir précisément l'hamiltonien du système. Tout système « isolé » réel sera soumis à des perturbations extérieures résiduelles perturbant sa dynamique.
- **Hasard ontologique** : La seconde raison fondamentale a trait à la nature intrinsèquement **probabiliste** de la description **quantique** des constituants élémentaires. Dans le cadre quantique, toute observation (mesure) a un caractère stochastique [42].

1. Cf. Alexia Auffèves, « Qu'est-ce que le hasard quantique ? », CNRS Le journal, 02/11/2017.

2 Probabilités et variables aléatoires

2.1 Évènements et probabilités

Lorsque l'occurrence d'un phénomène présente un caractère aléatoire, soit pour des raisons intrinsèques comme dans le cadre quantique, soit pour des raisons pratiques, parce que le résultat dépend d'un trop grand nombre de paramètres qu'on ne peut pas contrôler, il est plus efficace de raisonner en termes probabilistes. C'est par exemple le cas si l'on joue à pile ou face (pour la seconde raison) ou si l'on étudie la désintégration d'un noyau atomique instable (pour la première raison).

Pour formaliser le problème on introduit l'*espace des évènements* (ou *éventualités*) pouvant se produire lors d'une expérience *reproductible*, $\mathcal{E} = \{e_1, e_2, \dots, e_M\}$, que nous avons ici supposés dénombrables et en nombre fini (M). Chaque évènement représente un résultat possible lors de la réalisation de l'expérience.

Une analyse statistique peut nous donner les probabilités d'occurrence des M évènements. Considérons N réalisations de l'expérience telles que l'évènement e_m , choisi parmi les M , se produise N_m fois (donc $\sum_{m=1}^M N_m = N$). Insistons : ce nombre est aléatoire et si l'on réalise N autres fois l'expérience, e_m se produira N'_m fois, a priori différent de N_m . La probabilité de l'évènement e_m est définie par

$$P_m \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{N_m}{N} \quad (2.4)$$

Par construction on a $0 \leq P_m \leq 1$ et les M probabilités satisfont la condition

$$\sum_{m=1}^M P_m = 1 \quad (\text{normalisation}). \quad (2.5)$$

Exemple : Pile ou face

Si l'on jette une pièce de monnaie, la dynamique de ce corps solide dans le fluide (l'air) est extrêmement complexe aussi il est plus simple d'analyser le résultat du lancer en termes probabilistes. Deux résultats peuvent se produire (nous excluons le cas où la pièce tombe sur la tranche !), ce qui définit l'espace des $M = 2$ évènements $\mathcal{E} = \{\text{pile}, \text{face}\}$.

Les probabilités associées aux deux résultats peuvent être obtenues « expérimentalement » par une analyse statistique (fastidieuse) comme expliqué ci-dessus. Plus simplement, on peut faire appel à des considérations de symétrie : si la pièce est non truquée, les deux résultats sont équiprobables, $P_{\text{pile}} = P_{\text{face}} = 1/2$.

2.2 Variable aléatoire discrète

Dans la pratique, on détermine quel évènement e_m est réalisé en effectuant la mesure d'une certaine grandeur X : pour chaque évènement e_m , la mesure de X donne une valeur $x^{(m)}$ (un nombre entier ou réel ou complexe,...). On dira que X est une *variable aléatoire*.² Si les évènements sont dénombrables, X prend ses valeurs parmi un ensemble de valeurs $\{x^{(m)}\}_{m=1,\dots,M}$ (on peut avoir $M = \infty$) et on dit que la variable aléatoire est *discrète*. Afin de caractériser la variable aléatoire, on introduit sa *distribution de probabilité* :

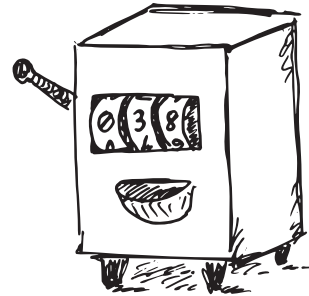
$$P(x) \stackrel{\text{def}}{=} \text{Proba}\{X = x\} = \sum_{m \text{ t.q. } x^{(m)}=x} P_m = \sum_{m=1}^M P_m \delta_{x, x^{(m)}}, \quad (2.6)$$

où le symbole de Kronecker $\delta_{i,j}$ (0 si les arguments sont distincts, 1 s'ils sont égaux) nous a permis de déplacer la contrainte ailleurs que sur la sommation. Notons que plusieurs évènements pourraient être associés à une même valeur $x^{(m)} = x^{(m')}$. Si les valeurs $x^{(m)}$ sont toutes distinctes, on a simplement $\text{Proba}\{X = x^{(m)}\} = P_m$.

Exemple : Machine à sous

On joue avec une machine à sous qui peut sortir aléatoirement trois chiffres entre 0 et 9, i.e. $M = 10^3 = 1000$ résultats. Les 1000 évènements sont équiprobables : $P_1 = \dots = P_{1000} = 1/1000$ (sinon le casino triche).

- Les 10 évènements pour lesquels les trois chiffres sont identiques, $e_1 \equiv (000)$, $e_2 \equiv (111)$,... $e_{10} \equiv (999)$, font gagner $s_3 = 10$ €.
- Les $10 \times 9 \times 3 = 270$ évènements pour lesquels deux chiffres sont égaux sur les trois, notés $e_{11} \equiv (100)$, $e_{12} \equiv (200)$,... $e_{19} \equiv (900)$, $e_{20} \equiv (010)$,... , $e_{280} \equiv (998)$, font gagner $s_2 = 5$ €.
- Les 720 autres évènements ne font rien gagner, $s_1 = 0$ €.



Le gain $S \in \{s_1, s_2, s_3\}$ est donc une variable aléatoire dont la distribution est $P(s_1) = 18/25$, $P(s_2) = 27/100$ et $P(s_3) = 1/100$ (figure 2.1)

2.3 Variable aléatoire continue – Densité de probabilité

Une *variable aléatoire discrète* prend des valeurs parmi un ensemble dénombrable, $\{0 \text{ €}, 5 \text{ €}, 10 \text{ €}\}$ dans l'exemple précédent. Toutefois, dans de nombreux cas l'espace des évènements n'est pas un ensemble dénombrable et la variable aléatoire peut varier

2. Mathématiquement, une variable aléatoire est donc une application allant de l'espace des évènements $\mathcal{E}$ vers l'ensemble des valeurs prises par la variable. Dans le chapitre, nous noterons les variables aléatoires en majuscules.