



CHAPITRE 7

Qu'est-ce que la mécanique statistique ?

Roman Frigg

Traduit de l'anglais par Soazig Le Bihan

1. Introduction

Commençons par un exemple caractéristique. Considérons un gaz confiné dans la moitié gauche d'un récipient. Enlevons maintenant la paroi de séparation entre les deux moitiés du récipient. Le résultat est que le gaz se propage rapidement, jusqu'à remplir le récipient dans sa totalité. Ceci est illustré par la figure 1.



Figure 1. Propagation du gaz après que la paroi du milieu a été ôtée

Le gaz a atteint l'état d'équilibre. Ce processus présente un aspect important : il est unidirectionnel. On a vu le gaz se propager – *i.e.* on l'a vu évoluer vers une situation d'équilibre –, mais jamais on n'a vu un gaz retourner spontanément dans la moitié gauche du récipient – *i.e.* on n'a jamais vu un gaz s'écarter de lui-même d'un état d'équilibre. Et ce n'est pas là un caractère spécifique à notre gaz. On voit fondre des glaçons, le café se refroidir et le lait se mélanger au thé, tout cela de façon spontanée. Jamais on ne voit, en revanche, des glaçons émerger soudain de l'eau tiède, ni le café se réchauffer spontanément, ni la cuillerée de lait se séparer du reste de la tasse de thé noir. De fait, tous les systèmes, indépendamment de leurs compositions particulières, se comportent de cette façon ! Ce fait est consacré par le second principe de la thermodynamique, qui, en gros, dit qu'aucune transition ne peut avoir lieu depuis



un état d'équilibre vers un état de déséquilibre. La thermodynamique (TD)¹ donne une description d'un système donné d'après ses propriétés macroscopiques, comme la pression, le volume ou la température. Ses lois sont strictement formulées sur la base de ces propriétés et ne font aucune référence à la constitution microscopique du système. C'est pour cette raison que TD est une théorie dite « macroscopique ». Afin de donner une formulation précise au second principe, TD introduit une quantité appelée l'entropie (dont nous ne nous préoccupons pas ici de la définition précise). Le second principe dit alors que l'entropie des systèmes fermés (tels que notre gaz) ne peut pas décroître, et, de fait, les processus tels que la propagation de notre gaz sont caractérisés par une augmentation d'entropie.

Il y a cependant une autre façon, complètement différente, de considérer ce même gaz. Le gaz est, en effet, constitué d'un grand nombre de molécules (un récipient moyen de laboratoire contient quelque chose comme 10^{23} molécules). Ces molécules se baladent ici et là, leur mouvement dépendant des forces qui s'exercent sur elles quand elles entrent en collision avec les parois du récipient et/ou avec les autres molécules. Le mouvement de chacune de ces molécules sous l'influence de telles forces est gouverné par les lois de la mécanique, que, dans la suite, nous supposons être les lois de la mécanique classique (MC)². En d'autres termes, le gaz n'est autre qu'un grand système mécanique et tout ce qui s'y passe est déterminé par les lois de MC. Du fait que, dans ce contexte, MC gouverne le comportement des constituants microscopiques du système considéré, on l'appelle la « micro-théorie ».

La question se pose de savoir comment ces deux façons de considérer notre gaz peuvent être combinées. Puisque ni l'approche thermodynamique ni l'approche mécanique ne saurait être privilégiée, elles se doivent de mener toutes deux aux mêmes conclusions. En particulier, il faut pouvoir montrer que la validité du second principe – une loi empiriquement bien confirmée – peut être dérivée de la description en termes mécaniques. C'est là précisément la tâche de la mécanique statistique (MS). Les deux questions fondamentales auxquelles cette dernière tente de répondre sont les suivantes. Premièrement : comment caractériser l'état d'équilibre d'un point de vue mécanique ? C'est là la question centrale de la physique statistique à l'équilibre. Deuxièmement : qu'est-ce qui explique, au niveau des molécules et de leur mouvement, que le gaz se propage et atteint un nouvel état d'équilibre quand on enlève la paroi de séparation ? Plus encore : comment expliquer que le processus inverse n'ait pas lieu ? C'est là le problème central de la physique statistique hors équilibre.

-
1. Pour une présentation classique de TD, voir par exemple Fermi (1936), Giles (1964) et Pippard (1966).
 2. Nous savons désormais que la mécanique quantique, et non la mécanique classique, est la théorie fondamentale de la matière. Dans le contexte de ce chapitre, nous en resterons à la mécanique classique parce que les problèmes centraux liés à la mécanique statistique, d'une part, restent *mutatis mutandis* les mêmes que l'on considère la mécanique classique ou la mécanique quantique, mais, d'autre part, sont d'une discussion plus aisée quand on n'a pas à gérer, en plus, tous les problèmes conceptuels propres à la mécanique quantique.

Par conséquent, on peut donner de MS la caractérisation abstraite suivante : MS est l'étude du lien entre la microphysique et la macrophysique : son but est de rendre compte du comportement macroscopique des systèmes physiques d'après leurs constituants microscopiques. La présence du terme « statistique » dans « MS » est due au fait que, comme nous le verrons, il est nécessaire d'introduire des éléments de probabilité dans la théorie pour donner une explication en termes mécaniques. Le but de ce chapitre est de présenter les principes les plus importants de MS, ainsi que les problèmes fondationnels auxquels elle fait face¹.

Un tel projet se heurte immédiatement à une difficulté, qui est que, dans le cas de MS, les discussions sur les fondements de la physique ne peuvent pas prendre pour point de départ un formalisme accepté de tous comme elles le font généralement dans les autres domaines. À la différence de la mécanique quantique et de la théorie de la relativité, MS n'a pas encore de cadre théorique accepté, et encore moins de formulation canonique. On trouve sous le nom de MS une pléthore d'approches et d'écoles différentes, chacune caractérisée par ses propres outils mathématiques et son propre programme de recherche.

Toutes ces écoles peuvent cependant être classées soit en tant que « boltzmanniennes » soit en tant que « gibbsiennes », selon qu'elles font usage (avec de légères variantes) de l'un ou de l'autre des cadres théoriques associés respectivement à Boltzmann (1877) pour le premier et à Gibbs (1902) pour le second. Pour cette raison, je diviserai ma présentation de MS en deux parties : l'une boltzmannienne et l'autre gibbsienne. Il est important, au moins au départ, de bien distinguer ces deux cadres théoriques, parce qu'ils offrent chacun des caractérisations nettement différentes de l'équilibre comme du déséquilibre, et que, de ce fait, ils présentent chacun des problèmes qui leur sont propres. Mais avant de pouvoir nous embarquer dans une discussion concernant ces approches, il nous faut d'abord en dire plus sur MC.

2. La mécanique classique : rappels

MC peut être présentée dans des formulations différentes, plus ou moins (même si pas totalement) équivalentes : la mécanique newtonienne, la mécanique lagrangienne, la mécanique hamiltonienne, et la théorie Hamilton-Jacobi². Parce qu'elle est la formulation la plus adaptée à l'utilisation de MC par MS, cette section ne traite que de la mécanique hamiltonienne.

MC décrit le monde comme étant constitué de points matériels, qui sont localisés en un certain point de l'espace et ont une quantité de mouvement propre (la quantité de mouvement d'une particule est essentiellement le produit de la vitesse

-
1. Pour une présentation plus complète de MS, voir Sklar (1993), Uffink (2007), Frigg (2008). Pour ceux qui seraient intéressés par la longue et sinueuse histoire de MS, voir Brush (1976) et von Plato (1994).
 2. On trouvera une présentation complète de MC dans Arnold (1978), Goldstein (1980), Abraham & Marsden (1980), et José & Saletan (1998).

par la masse de cette particule). L'état d'un système est déterminé de façon complète une fois spécifiées la position et la quantité de mouvement de chacune des particules – c'est-à-dire que dès lors que l'on connaît les positions et quantités de mouvement de toutes les particules du système, on sait tout ce qu'il y a à savoir quant à l'état du système du point de vue mécanique. En prenant la position et la quantité de mouvement de chacune des particules d'un système comme dimensions conjointes dans un unique espace vectoriel, on forme ce qu'on appelle l'espace des phases Γ du système. Par exemple, l'espace des phases d'une particule se déplaçant dans l'espace à trois dimensions de notre expérience ordinaire est constitué de tous les points $X = (x, y, z, p_x, p_y, p_z)$, où x , y et z sont les trois directions de l'espace, et p_x , p_y et p_z sont les composantes de la quantité de mouvement le long des axes x , y et z respectivement. L'espace des phases d'une particule est donc un espace à six dimensions (mathématiques)¹. L'espace des phases d'un système constitué de deux particules est l'ensemble des points $X = (x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, p_{x1}, p_{y1}, p_{z1}, p_{x2}, p_{y2}, p_{z2})$, où x_1, y_1 et z_1 sont les coordonnées de positions de la première particule, x_2, y_2 et z_2 sont les coordonnées de positions de la seconde particule, et p_{x1}, \dots sont les composantes de quantité de mouvement le long des axes de coordonnées. Par conséquent, l'espace d'un tel système est un espace à douze dimensions. On peut maintenant aisément généraliser cela à tout système à n particules – le type de système étudié par MS : l'espace des phases est un espace mathématique abstrait à $6n$ dimensions. Quand X est l'état d'un gaz à n particules, il est aussi appelé *micro-état* du système.

L'espace des phases Γ possède une propriété importante : il peut être doué de ce qu'on appelle une mesure de Lebesgue μ . Bien que Γ soit un espace mathématique abstrait, la notion de mesure est semblable à l'idée intuitive de volume dans l'espace à trois dimensions de l'expérience ordinaire. On dit qu'un certain ensemble de points de l'espace (par exemple, l'ensemble des points à l'intérieur d'une bouteille) a un certain volume (par exemple, un litre), et, de la même façon, on peut dire qu'un ensemble de points de l'espace Γ a une certaine μ -mesure. Étant donné A , un ensemble de points dans Γ , $\mu(A)$ représente la μ -mesure de cet ensemble. Au début, il peut sembler contre-intuitif de parler de mesures (de « volumes ») dans des espaces de dimensions supérieures à trois (comme l'expression de X ci-dessus le montre,

1. L'usage du terme « espace » en physique est une source possible de confusion. D'un côté, le terme est utilisé dans son sens courant, c'est-à-dire pour faire référence à l'espace à trois dimensions de notre expérience ordinaire. D'un autre côté, c'est tout un ensemble de structures mathématiques auquel on fait référence sous le nom d'« espace », même si ces structures n'ont rien à voir avec l'espace de notre expérience ordinaire (mis à part des propriétés algébriques, ce qui explique pourquoi ces structures se sont vu donner le nom d'« espace »). Les espaces mathématiques peuvent posséder plus de trois dimensions ; de fait, ils peuvent avoir n'importe quel nombre de dimensions, où, en gros, le nombre de dimensions d'un espace n'est autre que le nombre de paramètres nécessaire pour caractériser pleinement un objet dans cet espace. L'espace des phases d'un système mécanique appartient à ce dernier type d'espace. C'est un espace mathématique abstrait regroupant toute information concernant l'état du système, ce qui veut dire que si l'on sait où se trouve le système dans cet espace, alors on connaît toutes ses propriétés physiques : ces propriétés peuvent être « lues » depuis la représentation du système dans l'espace des phases, bien qu'il n'y ait aucune expérience « phénoménale » de cet espace.

l'espace des phases d'une particule a six dimensions, et celui de deux particules en a douze). Cependant, le passage aux dimensions supérieures paraît plutôt naturel quand on le pense dans la continuité du passage de la longueur, qui est la mesure de Lebesgue à une dimension, à la surface, mesure de Lebesgue à deux dimensions, et enfin au volume, mesure de Lebesgue à trois dimensions.

L'état du système change généralement au cours du temps : par exemple, il peut changer de $X = (0,0,0,1,3,2)$ à $X = (7,5,88,3,2,6)$ durant un intervalle de cinq secondes. Ce changement n'a pas lieu de façon arbitraire, mais en accord avec ce qu'on appelle les équations du mouvement de Hamilton. Nul n'est besoin de s'arrêter à la forme et au caractère précis de ces équations, mais soulignons deux points importants. Premièrement, ces équations, dans leur forme générale, sont des « schémas d'équation », du fait qu'elles contiennent une case vide, pour ainsi dire. Cette case vide doit se voir remplie par une fonction H qui spécifie la façon dont l'énergie du système dépend de son état. Une telle dépendance prend différentes formes pour différents systèmes. C'est ici que les propriétés physiques spécifiques du système considéré entrent en jeu, et différents hamiltoniens donnent lieu à différents types de mouvements. Deuxièmement, si le hamiltonien que l'on insère dans les équations générales possède certaines propriétés sympathiques (comme dans les cas qui nous intéressent ici¹), alors les équations ont des solutions uniques dans le sens suivant : si on choisit un instant particulier dans le temps (on peut choisir n'importe quel instant, mais on ne peut en choisir qu'un seul), que l'on appelle t_0 ; si ensuite on prépare le système dans un état particulier, que l'on appelle « conditions initiales », et concernant lesquelles on a toute liberté de choix ; si donc on fait tout cela, alors les équations du mouvement (qui comprennent désormais le hamiltonien propre au système considéré) déterminent de façon unique l'état du système à *tout* autre instant t . L'expérience de pensée suivante devrait permettre d'illustrer cela de façon plus claire. Imaginons que vous avez 1 000 copies d'un même système (au sens où toutes les copies comprennent le même nombre de particules et sont gouvernées par le même hamiltonien), et que vous préparez tous ces systèmes de telle sorte qu'ils soient tous dans le même état initial à t_0 . Laissez maintenant ces systèmes évoluer librement pendant une heure avant d'y revenir. Vous pourrez alors constater que les 1 000 systèmes, bien qu'ils soient probablement dans un état différent de l'état initial, sont tous exactement dans le même état ! Et cela est vrai quel que soit le nombre de systèmes considérés, que vous en ayez 10 000 ou 100 000 ou autres. Jamais aucun système ne dévient du comportement de l'ensemble.

La fonction qui indique l'état du système dans le futur est appelée « flux hamiltonien » et nous y ferons référence au moyen de la lettre Φ . On note $\Phi_t(X)$ l'état dans lequel X évolue en accord avec la dynamique du système quand le temps passe (par exemple, après une heure), et, de la même façon, on note $\Phi_t(A)$ l'image d'un ensemble A (d'états) suivant cette évolution. La « ligne » que trace $\Phi_t(X)$ dans l'espace des phases est appelée « trajectoire ».

1. Voir Arnold (2006) pour une discussion sur ces conditions.

Illustrons ceci avec un exemple simple. Considérons un pendule d'un type que l'on connaît bien, celui des horloges de nos grand-mères : un poids de masse m est fixé à un fil de longueur l et oscille de droite à gauche. Afin de faciliter les calculs, supposons que le fil est sans masse, qu'il n'y a ni friction ni résistance de l'air, et que la seule force s'exerçant sur le poids est la force de gravité. Il est alors aisé d'écrire le hamiltonien du pendule et de résoudre les équations. Les solutions se trouvent être des ellipses dans l'espace des phases – donc la trajectoire du système est une ellipse. La figure 2a montre les positions maximales du pendule à droite et à gauche ainsi que la trajectoire du pendule dans l'espace des phases. Selon les conditions initiales (jusqu'à où le poids est poussé sur le côté au départ), l'ellipse suivie varie. Ceci est illustré par la moitié supérieure de la partie droite de la figure 2.

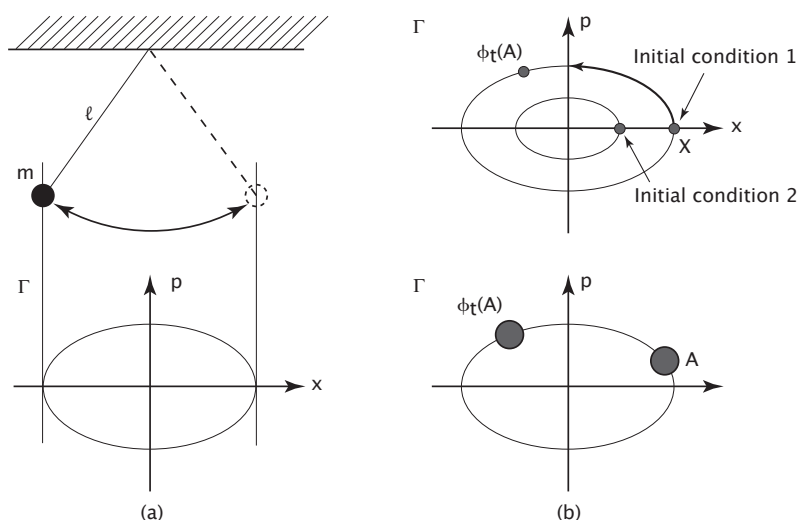


Figure 2. Le pendule et son flux hamiltonien

La dynamique hamiltonienne possède trois traits distinctifs. Le premier, connu sous le nom de « théorème de Liouville », est que la mesure μ est invariante pendant l'évolution dynamique du système : $\mu(A) = \mu(\Phi_t(A))$ pour tout A et tout t . Cela veut dire que la mesure d'un ensemble ne change pas au cours du temps : si on mesure un ensemble maintenant et à nouveau demain, on trouvera nécessairement la même valeur. Ceci est illustré par la moitié basse de la partie droite de la figure 2, où un cercle est représenté évoluant selon la dynamique du pendule mais dont l'aire reste constante.

Le second trait distinctif de la dynamique hamiltonienne est donné par le théorème de récurrence de Poincaré. En gros, ce théorème dit qu'un système repasse toujours, tôt ou tard, aussi près que l'on veut de son état initial. Le temps qu'il faut à un système pour retourner près de son état initial est appelé le « temps de récurrence de Poincaré ». La notion de récurrence est également illustrée de façon

simple dans l'exemple ci-dessus : le système repasse exactement par le même état après avoir complété chacune des oscillations. Dans le cas de cet exemple simple, qu'il y ait récurrence est évident. Ce qui est surprenant, c'est qu'on trouve ce genre de récurrence dans *tout* système, quel que soit le degré de complexité de son flux hamiltonien.

Le dernier trait distinctif de la dynamique hamiltonienne est ce qu'on appelle « l'invariance par inversion du temps ». Les équations de Hamilton jouent en un sens un rôle de censeur : elles dictent quelles évolutions sont autorisées et lesquelles ne le sont pas. Considérons, par exemple, une balle en mouvement de gauche à droite ; enregistrons ce mouvement sur une bande vidéo. Intuitivement, inverser le temps revient à lire la bande vidéo à l'envers, ce qui fait que la balle va de droite à gauche. On peut alors poser la question : si ce mouvement (de gauche à droite) est autorisé par la théorie, le mouvement inverse (de droite à gauche) l'est-il également ? Toute théorie qui donne une réponse positive à cette question est dite invariante par inversion du temps. Il se trouve que les équations de Hamilton ont cette propriété (et cela est loin d'être trivial : toutes les équations du mouvement ne sont pas invariantes par inversion du temps). Ici encore, notre exemple précédent donne une illustration simple de la notion d'invariance par inversion du temps : le pendule peut évidemment se mouvoir dans les deux sens.

3. L'approche de Boltzmann

Au cours de ses années de travail, Boltzmann a développé une multitude d'approches de MS. En général cependant, les boltzmanniens d'aujourd'hui adoptent celle introduite par Boltzmann (1877) et simplifiée par Ehrenfest et Ehrenfest (1912) comme point de départ¹. C'est pour cela que je me concentrerai ici sur cette approche en renvoyant le lecteur à Klein (1973), Brush (1976), Sklar (1993), von Plato (1994), Cercignani (1998) et Uffink (2004, 2007) pour une discussion des autres approches boltzmanniennes.

Commençons par les macro-états. On suppose que tout système possède un certain nombre de macro-états M_1, \dots, M_k (où k est un nombre entier naturel qui dépend des spécificités du système considéré), qui sont caractérisés par les valeurs de variables macroscopiques, comme par exemple, dans le cas d'un gaz, la pression, la température et le volume. Si on reprend notre exemple présenté en introduction, l'un de ces macro-états correspond à l'état du gaz quand celui-ci est confiné dans la moitié gauche du récipient, et un autre correspond à l'état du gaz quand celui-ci s'est propagé dans la totalité du récipient (ce dernier état est dit « macro-état d'équilibre »).

1. La version de l'approche de Boltzmann présentée dans cette section est celle adoptée par, entre autres, Lebowitz (1993a, 1993b, 1999), Bricmont (1996), Albert (2000), Goldstein (2001), Goldstein & Lebowitz (2004) et Zanghi (2005).

Parmi tous les macro-états, deux sont privilégiés : l'état initial (le gaz confiné dans la partie gauche) et l'état d'équilibre final (le gaz réparti de façon homogène dans tout le récipient). Il sera utile plus tard de pouvoir faire référence à ces états par des symboles spéciaux : M_p et M_{eq} , respectivement.

L'un des postulats fondamentaux de l'approche de Boltzmann est que le macro-état de tout système survient sur le micro-état de ce système, ce qui veut dire que tout changement au niveau du macro-état doit être accompagné d'un changement au niveau du micro-état X : si donc M change, X doit changer également. Par exemple, il n'est pas possible de changer la pression d'un système tout en conservant le micro-état inchangé. Par conséquent, à tout micro-état donné correspond un macro-état et un seul ; appelons $M(X)$ ce macro-état. Notons bien que nous n'avons pas ici de correspondance bijective. De fait, plusieurs X peuvent correspondre au même macro-état. Si maintenant on regroupe tous les micro-états qui correspondent à un même macro-état, on obtient une partition de l'espace des phases divisé en régions disjointes, dont chacune correspond à un macro-état. C'est pourquoi on use des mêmes lettres M_1, \dots, M_k pour dénommer les macro-états et les régions correspondantes dans l'espace des phases. Ceci est illustré par la figure 3a.

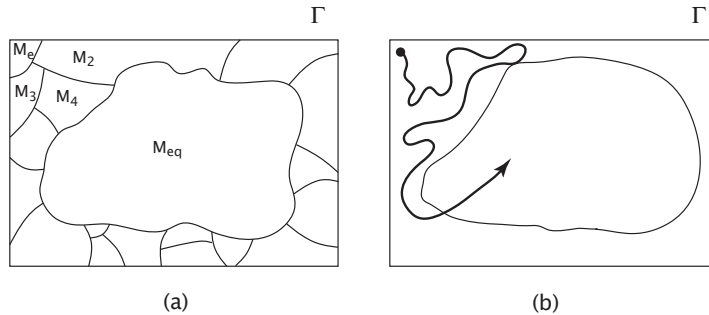


Figure 3. Partition et approche de l'équilibre

Nous sommes maintenant prêts à faire connaissance avec l'entropie de Boltzmann. Pour cela, rappelons que nous avons défini une mesure sur Γ qui assigne un volume à tout ensemble de Γ , et par conséquent aussi aux macro-états. Gardant ceci à l'esprit, on peut définir l'entropie de Boltzmann $S_B(M_i)$ d'un macro-état (M_i) comme le produit d'une constante – appelée constante de Boltzmann k_B – par le logarithme de la mesure du macro-état : $S_B(M_i) = k_B \log[\mu(M_i)]$. La propriété importante du logarithme est que c'est une fonction monotone : plus $\mu(M_i)$ est grand, plus son logarithme est grand. Il s'ensuit que plus un macro-état est grand, plus son entropie est grande !

On peut montrer que, au moins dans le cas des gaz dilués, l'entropie de Boltzmann correspond à l'entropie thermodynamique (au sens où toutes deux sont fonction des variables de l'état de la même façon), et de ce fait, il est raisonnable de dire que l'état d'équilibre est le macro-état dont l'entropie de Boltzmann est maximale. Soit M_{eq}

cet état. On suppose que le système est initialement dans un état dont l'entropie est faible (par exemple, le gaz confiné dans la moitié gauche du récipient). Pour des raisons qui apparaîtront plus claires dans la suite, nous appelons cet état initial « l'état passé » et le notons M_p . Quiconque tente d'expliquer les processus d'approche de l'équilibre doit alors répondre à la question suivante : pourquoi un système dans l'état M_p en vient-il à passer à l'état M_{eq} ? (Voir Figure 3b).

Plus précisément, si l'on voulait justifier le second principe, alors il faudrait montrer que *tout* système initialement en M_p doit suivre une trajectoire telle qu'il finira en M_{eq} . Cela est malheureusement trop ambitieux : il est généralement entendu que le mieux que l'on puisse espérer est de justifier une version affaiblie du second principe, à savoir une version « statistique » que j'appelle ici la « loi de Boltzmann » (LB) :

Considérons un moment arbitraire du temps $t = t_1$, et supposons que l'entropie de Boltzmann du système $S_B(t_1)$ est, à ce moment du temps, très faible par rapport à sa valeur maximale possible. Il est alors fortement probable qu'à tout moment futur $t_2 > t_1$, on ait $S_B(t_2) > S_B(t_1)$.

Le problème central est maintenant d'expliquer ce que cela peut vouloir signifier qu'une augmentation d'entropie est « fortement probable ». Ce problème a deux aspects : un conceptuel et un formel. Le problème conceptuel consiste à expliquer quelle notion de probabilité entre ici en jeu : que veut-on dire quand on déclare qu'une augmentation d'entropie est fortement *probable*¹ ? Le problème formel consiste à justifier l'affirmation qui est faite dans LB, et dont la vérité dépend essentiellement de la dynamique du système.

On voit facilement deux façons d'introduire les probabilités dans l'appareil mathématique que nous avons déployé jusqu'à présent². La première, associée à Boltzmann (1877), interprète les probabilités comme des moyennes sur le temps. Plus spécifiquement, l'idée est que la probabilité d'un macro-état est la proportion de temps que le système passera réellement dans cet état au total. Par exemple, si le système passe 10 % de son temps dans le macro-état M_1 , alors la probabilité de ce dernier est de 0,1.

Boltzmann avait déjà conscience du fait qu'un présupposé dynamique important était nécessaire pour qu'une telle idée tienne la route : le système doit être « ergodique ». *Grosso modo*, un système est ergodique si, en moyenne, le temps qu'il passe dans un sous-ensemble donné de l'espace des phases est proportionnel à la part de l'espace des phases qu'occupe ce sous-ensemble³. Ainsi, par exemple, si un sous-ensemble A occupe un quart de l'espace des phases, un système ergodique passera

1. Pour une discussion en profondeur des différentes approches possibles concernant les probabilités, voir Howson (1995), Gillies (2000), Galavotti (2005) et Mellor (2005).
2. Pour une discussion de la question des probabilités au sein de l'approche boltzmannienne, voir Frigg (2009a) ainsi que les références qui s'y trouve.
3. On pourra trouver des discussions de l'approche ergodique dans Sklar (1993, chap. 5), Emch & Liu (2002, chap. 7-9), Uffink (2007, sect. 6) et Frigg (2008, sect. 3.2.4). Pour un compte rendu de l'histoire de la théorie ergodique, voir Sklar (1993, chap. 2) et von Plato (1994, chap. 3). Lavis (2005) développe une approche fondée sur l'ergodicité mais qui évite de tomber dans certaines des difficultés communes.

un quart de son temps dans le sous-ensemble A. Il suit immédiatement de cela que le macro-état qui a le plus de chance d'être l'état d'équilibre est bien notre état d'équilibre, comme nous le souhaitions.

La question de la formulation mathématique correcte de l'ergodicité fut longtemps un problème formidable, et ne fut résolue de façon satisfaisante qu'un demi-siècle après que Boltzmann en eut avancé l'idée. Et même alors, on n'en avait pas fini de rencontrer des difficultés. D'un côté, on prit rapidement conscience du fait que certains systèmes se comportaient bien comme voulu (*i.e.* ils s'approchaient de l'équilibre), sans pour autant être ergodiques. L'ergodicité ne saurait donc prise comme l'ingrédient clef dans l'explication du comportement thermodynamique. D'un autre côté, certaines difficultés techniques se présentent qui semblent jeter un doute sur la viabilité de cette approche.

La seconde approche se concentre sur la structure interne des macro-états et assigne des probabilités en utilisant ce qu'on appelle le *postulat statistique* (PS), qui pose que, étant donné un système dans un macro-état M , la probabilité que le micro-état de ce système se trouve dans un sous-ensemble A de M est proportionnelle à la taille de ce sous-ensemble : $p(A) = \mu(A)/\mu(M)$. Cela est illustré en Figure 4a.

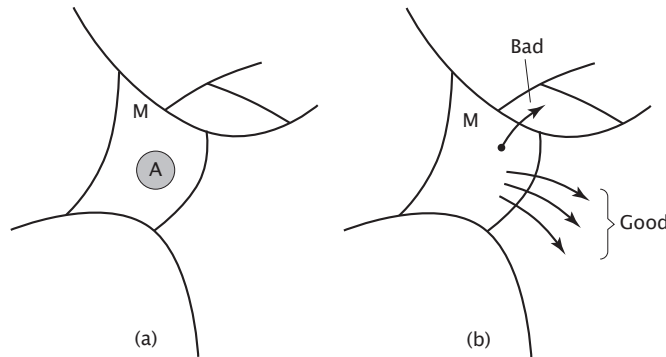


Figure 4. Le postulat statistique

En quoi ce postulat peut-il être utile pour expliquer LB ? Pour répondre à cette question, il faut se souvenir que le flux hamiltonien Φ_t détermine le futur de tout point X de l'espace des phases de façon complète, et donc, *a fortiori*, de tout point de M . Du coup, on peut classer les points de M en deux catégories : les « bons » et les « mauvais », les bons étant ceux qui rejoignent un macro-état d'entropie supérieure quand leur trajectoire sort de M , les mauvais étant ceux qui rejoignent un macro-état d'entropie inférieure. Cela est illustré par la figure 4b. Soit donc A un ensemble de bons points. Alors, la probabilité que l'entropie augmente est de $\mu(A)/\mu(B)$. C'est la probabilité dont il est question dans LB, et dont il est requis qu'elle soit forte.

La question centrale est donc maintenant la suivante : quelles raisons avons-nous de croire que le rapport $\mu(A)/\mu(B)$ est important pour tous les macro-états (à l'exception de l'état d'équilibre lui-même) ? Cela dépend du flux hamiltonien Φ_t du système, qui dépend à son tour du hamiltonien du système (la fonction représentant son énergie). Il est clair que certains hamiltoniens ne produisent pas le type de flux hamiltonien qui rend PS vrai. La question de savoir, premièrement, quel type de hamiltonien le fait, et, deuxièmement, si le hamiltonien du système considéré en fait partie, n'est donc pas mince. Cela dit, bien que cette question soit de prime importance, elle n'a, de façon assez étonnante, reçu que peu d'attention dans la littérature récente concernant l'approche de Boltzmann. De la même façon, est restée dans l'ombre la question de savoir pourquoi une version plus complexe de PS est vraie, question vers laquelle nous nous tournons ci-dessous. L'approche qui semble la plus prometteuse est celle qui fait appel à des arguments de typicalité, arguments proposés à l'origine par Goldstein (2001) et dont le lecteur trouvera une discussion – ainsi que des références supplémentaires – dans Frigg (2009b)¹.

Cela dit, même si on parvient à résoudre cette question, d'autres problèmes se présentent. Comme Loschmidt l'a fait remarquer dans une controverse qui l'opposait à Boltzmann dans les années 1870, essayer d'expliquer le comportement unidirectionnel d'un système en faisant appel à ses caractères dynamiques est nécessairement problématique, du fait qu'il n'existe aucune forme d'unidirectionnalité au niveau mécanique. De fait, comme nous l'avons vu plus haut, la mécanique hamiltonienne est invariante par inversion du temps, et donc, tout ce qui peut se passer dans un sens peut également se passer dans l'autre. Plus précisément, si la transition depuis un état d'entropie faible à un état d'entropie supérieure est autorisée par la mécanique sous-jacente (ce que nous souhaitons), alors la transition inverse, depuis un état d'entropie forte à un état d'entropie inférieure (ce que nous voudrions éviter), est autorisée également ! Ce problème est connu sous le nom d'objection de réversibilité de Loschmidt.

On pourrait être tenté d'essayer d'atténuer la force de cet argument en soulignant que LB est une loi probabilitaire et non universelle (et que, par conséquent, elle permet que quelques transitions indésirables se produisent), et en arguant ensuite que de telles transitions indésirables sont peu probables. Malheureusement, un tel espoir est brisé dès qu'on y regarde de plus près. Les calculs montrent que, si la probabilité qu'un système dans un macro-état M évolue vers un état d'entropie supérieure dans le futur est forte (ce que nous souhaitons), alors, du fait de l'invariance par inversion du temps de la dynamique sous-jacente, la probabilité que le système ait évolué vers son état actuel M depuis un état M' d'entropie supérieure à M est tout aussi forte (voir Albert, 2000, chap. 4 sur ce point). Cela est en contradiction directe avec notre expérience de tous les jours et LB elle-même. Considérant la tasse de café tiède sur

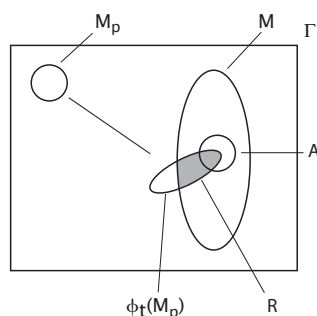
1. Intuitivement, une propriété est « typique » si elle est caractéristique d'un type, *i.e.* si les membres d'un certain groupe possède tous ou presque tous cette propriété. L'idée principale des arguments de typicalité concernant MS est de concevoir le comportement thermodynamique comme typique. (NDT)

mon bureau, PS mène à la rétrodiction¹ absurde qu'il est plus que probable que le café était froid il y a cinq minutes (et l'air autour était plus chaud), qu'il a ensuite quitté son état d'équilibre pour devenir plus chaud, et qu'il sera enfin à nouveau froid dans cinq minutes. L'expérience montre qu'au contraire, le café était chaud il y a cinq minutes, s'est refroidi un peu depuis, et continuera de se refroidir dans les minutes qui viennent.

Avant d'aborder ce problème, ajoutons une autre difficulté, connue désormais sous le nom d'« objection de récurrence de Zermelo ». Comme nous l'avons vu plus haut, le théorème de Poincaré dit, en gros, que presque tous les points de l'espace des phases se trouvent sur une trajectoire qui retournera, au bout d'un temps *fini* (le temps de Poincaré), aussi près que l'on veut du point de départ. Comme Zermelo en fit la remarque en 1896, ceci a la fâcheuse conséquence que l'entropie ne peut pas augmenter tout le temps : tôt ou tard, il se trouvera une période durant laquelle l'entropie diminuera. Considérons à nouveau notre exemple initial du gaz dans un récipient (Figure 1) : une conséquence du théorème de Poincaré est qu'à un certain moment du temps dans le futur, le gaz retournera *de lui-même* se confiner dans la moitié gauche du récipient. Ce n'est évidemment pas ce à quoi on s'attend.

En réponse au premier problème ci-dessus (l'objection de Loschmidt), on a fait remarquer qu'il n'était pas surprenant qu'une approche essayant de justifier LB en faisant appel aux *seules* lois de la dynamique soit vouée à l'échec, étant donné que le comportement du système est réellement déterminé par les lois de la dynamique *et* les conditions initiales. Il n'y a donc pas nécessairement de contradiction entre l'idée que les lois de la physique sont invariantes par inversion du temps, et le fait que les transitions depuis des états d'entropie forte vers des états d'entropie faible soient extrêmement rares. Il suffit, pour lever la contradiction, de prendre en compte que le système possède au départ une faible entropie. Le second problème (celui des mauvaises rétrodictions) peut alors à son tour être résolu en conditionnalisant sur l'état initial du système, M_p . Cela revient à remplacer PS, dans lequel nulle référence n'est faite du passé du système, par une règle qui fait référence à ce passé. Une telle règle peut être conçue en considérant une classe d'états différente lors de l'attribution des probabilités à l'augmentation d'entropie. Avec PS, on considère *tous* les états dans M et on demande ensuite quelle proportion de ces états se verra dans le futur caractérisée par une entropie supérieure. Mais, nous dit-on, ce n'est pas là ce qu'il faut faire. Nous devrions ne considérer que les états de M qui possèdent le bon type de passé, *i.e.* ceux qui ont débuté dans M_p . La bonne question est donc celle de savoir quelle proportion de micro-états, non pas dans M , mais bien dans $R_t = M \cap \Phi_t(M_p)$, se voit dans le futur caractérisée par une entropie supérieure, où $\Phi_t(M_p)$ est le résultat de l'évolution dynamique de l'état initial depuis le début du processus. On doit alors remplacer PS par PS* : $p(A) = \mu(A \cap R_t) / \mu(R_t)$. Ceci est illustré en Figure 5.

1. En calcul des probabilités, une rétrodiction est l'inverse d'une prédiction : c'est en quelque sorte « une prédiction du passé ». (NdT)

Figure 5. Conditionnalisation sur M_p

Par construction, les micro-états de M possédant le mauvais type de passé sont exclus, comme voulu. Maintenant, si on choisit pour ensemble A dans PS^* l'ensemble des états qui sont dans le futur caractérisés par une entropie supérieure, il faut que les probabilités d'augmentation d'entropie données par PS^* soient fortes pour que LB soit vraie. Comme nous l'avons remarqué ci-dessus, la question de savoir pour quelle classe de hamiltoniens cette condition est satisfaite n'est pas mince. Malheureusement, on ne voit que peu de discussions à ce sujet dans la littérature, et la suggestion la plus prometteuse – bien qu'elle n'ait pas encore fait l'objet de recherches suffisamment approfondies – pourrait bien être une approche fondée sur la notion de typicalité.

La question de savoir comment choisir M_p est controversée. Le problème est de savoir à quel moment du temps on peut supposer que sont vérifiées les conditions initiales de basse entropie souhaitées. Il semblerait naturel de considérer le début de l'expérience comme pertinent ; on prépare le gaz de telle sorte qu'il soit confiné dans la partie gauche du récipient avant d'enlever la paroi de séparation : ce sont bien là les conditions d'entropie basse dont on a besoin. C'est du moins ainsi que nous avons traité le problème jusqu'à présent.

De nombreux physiciens et philosophes pensent que cette solution n'en est pas une, du fait que le problème resurgit dès lors que l'on se demande comment expliquer l'état d'entropie basse observé au début de l'expérience. Notre gaz fait, en effet, partie d'un système plus large comprenant le laboratoire, et même la personne qui a préparé le gaz, système qui existait déjà avant que l'expérience ne débute. Étant donné que ce large système est lui-même gouverné par les lois de MC, nous sommes bien obligés d'admettre qu'il y a de fortes chances qu'il a évolué vers l'état dans lequel il est au début de l'expérience depuis un état d'entropie supérieure. Et cet argument peut être répété à loisir, quel que soit l'instant initial choisi. Le problème est maintenant évident : quel que soit le moment du temps que l'on choisit comme satisfaisant des conditions initiales d'entropie basse, on peut montrer que la grande majorité des trajectoires compatibles avec cet état sont telles que l'entropie était plus

forte dans le passé. Nous faisons alors face à une régression à l'infini. Cette régression à l'infini ne peut être brisée qu'en supposant qu'il existe un instant qui n'a pas de passé, tout simplement. Dans ce cas, il n'y a pas de sens à dire que le système a évolué vers cet état depuis un autre état. En d'autres termes, il nous faut supposer que les conditions d'entropie basse sont satisfaites au commencement de l'Univers. Et de fait, c'est bien là la stratégie que beaucoup sont prêts à adopter : M_p n'est autre que l'état de l'Univers juste après le Big Bang. Compris de cette façon, la thèse selon laquelle le système est au départ dans un état de faible entropie est appelée *l'hypothèse sur le passé*¹, et M_p est appelé *l'état du passé* (Albert, 2000, chap. 4). La cosmologie moderne est enfin censée soutenir *l'hypothèse du passé*, puisqu'elle nous dit que l'intervalle de temps qui s'est écoulé depuis le Big Bang, moment où l'univers fut créé, est long mais non pas infini, et que l'entropie de l'Univers était alors faible.

Cependant, *l'hypothèse sur le passé* n'est pas sans soulever d'objections. Earman (2006) défend la thèse que cette hypothèse n'est « même pas fausse », du fait qu'on ne peut même pas définir l'entropie de Boltzmann dans les modèles cosmologiques (relativistes) qu'il serait pertinent d'utiliser ici. Un autre souci, celui-ci plus philosophique, consiste en ce que le besoin d'introduire *l'hypothèse sur le passé* ne se fait sentir que si l'on a une conception bien particulière des lois de nature. Avec l'argument de régression à l'infini, nous sommes passés de la recherche d'explications concernant le comportement des objets de la vie courante, comme le récipient contenant du gaz, à des considérations concernant l'Univers en son entier. Mais cet argument ne vaut que si l'on suppose que les lois sont universelles, en ce sens qu'elles seraient valides en tout temps et partout : l'Univers entier – et non pas seulement le gaz, mais également le laboratoire, ainsi que la personne préparant le système pour l'expérience – est gouverné par les lois déterministes de MC. C'est uniquement sous cette hypothèse que se pose le problème de niveaux d'entropie forte avant le début de l'expérience. Or la question de l'universalité des lois, en particulier des lois de la mécanique, est loin d'être consensuelle. Certains pensent, avec Cartwright (1999), que ces lois ne valent que localement, et qu'il est simplement erroné d'affirmer qu'elles sont universelles. Or si l'on refuse de considérer le système constitué du gaz, de tout ce qu'il y a dans le laboratoire, du physicien faisant l'expérience, et au bout du compte de l'Univers tout entier, comme un grand système mécanique, alors on ne peut plus utiliser la mécanique pour prédire que le système se trouvait très vraisemblablement dans un état d'entropie supérieure avant que l'expérience ne commence, et il n'est plus besoin de faire appel à une *hypothèse cosmologique sur le passé*².

Les partisans d'une vue plus « locale » des lois cherchent à concevoir les systèmes physiques en termes de branches ou de ramifications, une approche qui est inspirée par les travaux de Reichenbach (1956) sur la direction du temps, et qui a été

1. « *Past Hypothesis* » en anglais. (NdT)

2. On trouvera un exposé des controverses concernant les lois de nature dans, entre autres, Armstrong (1983), Earman (1984) et Cartwright & Alexandrova (2006).

développée par Davies (1974) et discutée par Sklar (1993, 318-332). L'idée essentielle est que les systèmes qu'il est pertinent de considérer pour MS n'existent pas de tout temps avant, ni pour toujours après, que les processus thermodynamiques n'aient eu lieu. Au lieu de cela, ils se distinguent de l'environnement à un certain point (ils se « ramifient »), existent ensuite en tant que systèmes isolés pour un certain temps et, le plus souvent, enfin fusionnent à nouveau avec l'environnement. De tels systèmes sont appelés « systèmes en ramification¹ ». Par exemple, le système constitué d'un verre d'eau et de glaçons vient à l'existence quand quelqu'un met des cubes de glace dans l'eau, et cesse d'exister quand quelqu'un verse l'eau dans l'évier. La question devient alors celle de savoir pourquoi un système en ramifications tel que le verre d'eau et ses glaçons se comporte tel qu'il le fait. On peut alors donner une explication du type de celle donnée par l'*hypothèse sur le passé*, mais avec ceci de différent qu'on ne postule l'existence de l'état d'entropie faible non pas au commencement de l'Univers, mais seulement à l'instant après la ramification. Étant donné qu'il est stipulé que le système n'existait pas auparavant, la question ne se pose plus de savoir si le système a évolué dans son état actuel depuis un état d'entropie supérieure. Cette façon de penser cadre bien avec les vues des physiciens sur le sujet pour la simple raison que les états d'entropie faible sont préparés en laboratoire de façon régulière².

Quelle que soit la façon dont cette question se trouvera résolue, on devra faire face à trois autres problèmes. Le premier de ces problèmes est celui de l'interprétation des probabilités dans PS*. Nous n'avons rien dit jusqu'à présent à ce sujet. De fait, la question est loin d'être simple. La proposition la plus convaincante est celle de Lower (2001), selon qui les probabilités de PS* doivent être interprétées comme des chances humiennes au sens de Lewis (1994). Cela étant dit, comme le fait remarquer Frigg (2009a), cette interprétation n'est pas sans rencontrer certaines difficultés, et la question de l'interprétation des probabilités de PS* reste ouverte.

Le second problème est celui posé par l'objection de récurrence de Zermelo, qui, en gros, dit que l'entropie ne saurait augmenter constamment, puisque tout système mécanique en revient à un état aussi proche que l'on veut de son état initial après un intervalle de temps *fini*. Cette objection n'est cependant fatale que pour le second principe tel que formulé originellement. Si on considère LB en revanche, la récurrence n'implique aucune contradiction, du fait que LB ne requiert pas que l'entropie augmente *constamment*. Cela dit, il se pourrait que la récurrence soit parfois si répandue que la probabilité que l'entropie augmente ne soit plus aussi haute que voulue par LB. Bien qu'il n'y ait aucune raison de principe qui permette de rejeter cette possibilité, la réponse standard à cette objection est que c'est là une situation dont nous ne faisons jamais l'expérience (Callender, 1999, 370 ; Bricmont, 1996, sect. 4) : selon l'*hypothèse sur le passé*, notre Univers est encore aujourd'hui en un état d'entropie faible, fort éloigné de l'équilibre, et aucun phénomène de récurrence ne

1. « *Branch systems* » en anglais. (NdT)

2. Pour une discussion critique d'une telle approche, voir Albert (2000, chap.4).

devrait vraisemblablement avoir lieu dans des temps d'observation à notre échelle. Ceci est, bien entendu, compatible avec la possibilité que notre Univers connaisse des périodes de diminution d'entropie dans un futur lointain. Par conséquent, on ne devrait pas concevoir LB comme valide pour toujours. Notons que cette stratégie de réponse est aussi valable pour les partisans de l'approche en termes de ramifications, puisque le temps de récurrence de Poincaré est supérieur à l'âge de l'Univers même pour un petit système comme le gaz dans un récipient (Boltzmann a estimé que le temps nécessaire pour la récurrence d'un centimètre cube d'air était de $10^{10 \exp(19)}$ secondes). En somme donc, on peut contourner l'objection de Zermelo en abandonnant non seulement le second principe dans sa formulation stricte, mais aussi la validité universelle de LB. Le prix est lourd, mais c'est bien la seule façon de réconcilier la notion d'augmentation de l'entropie avec la récurrence de Poincaré.

Le troisième problème est celui du réductionnisme. Nous avons, jusqu'à présent, fait plusieurs suppositions réductionnistes. Nous avons supposé qu'un gaz n'était en réalité qu'une collection de molécules, et, de façon plus controversée, nous avons supposé que le second principe – ou un de ses cousins proches – devait pouvoir être dérivé des lois mécaniques gouvernant le mouvement des molécules de gaz. En langage philosophique, cela revient à dire que le but de MS est de réduire TD à la mécanique, plus certaines hypothèses statistiques.

Quelles sont les implications d'une telle réduction ? Durant ces dernières décennies, la question de la réduction a attiré l'attention de nombreux philosophes, et la littérature à ce sujet a explosé¹. Un tel enthousiasme n'a cependant pas atteint ceux travaillant sur les fondements de MS, et les débats philosophiques concernant la nature (ou même la désirabilité) de la réduction n'ont eu que peu d'impact sur la recherche sur les fondements de MS (cela autant pour la tradition bolzmannienne que pour l'approche de Gibbs). Les deux débats sont du coup curieusement dissonants. Si l'on regarde comment la question du réductionnisme est traitée dans la littérature concernant MS, on peut constater que, dans l'ensemble, tout le monde s'accorde à dire que MS doit œuvrer à dériver les lois de TD (ou quelque chose de semblable) depuis la théorie microscopique sous-jacente. Cela est familier à quiconque a connaissance des débats philosophiques concernant le réductionnisme. De fait, il s'agit précisément de ce que Nagel (1961, chap. 11) a proclamé être le but de toute réduction. On peut donc dire que la conception philosophique de la réduction qui se situe en arrière-plan (et cela le plus souvent de façon implicite et ininterrogée) des débats concernant MS est le modèle de Nagel.

Pourtant, la théorie de la réduction de Nagel est considérée par la plupart comme tellement défectueuse qu'elle en devient intenable. Du coup, nous nous trouvons dans une situation plutôt inconfortable : nous avons ici une théorie physique des

1. Kim (1998) donne une brève revue de la question ; pour une discussion détaillée des différentes positions possibles sur la question, voir Hooker (1981) et Batterman (2002, 2003) ; Dupré (1993) présente une perspective radicalement sceptique.

plus respectables, mais cette théorie semble fondée sur une conception de la notion de réduction qui est généralement regardée comme inacceptable par les philosophes. Les choses ne peuvent en rester là. Ou bien les critiques faites au modèle de Nagel n'ont pas prise dans le contexte de MS, ou bien il existe une autre conception, meilleure que celle de Nagel, dont on peut faire usage pour rendre raison de la façon dont MS est pratiquée. De façon assez surprenante, ce problème n'a pas été reconnu comme tel dans la littérature, et du coup nul ne sait quelle forme de réduction est en jeu dans MS.

4. L'approche de Gibbs

L'approche de Gibbs est, dès le départ, en rupture radicale avec le programme de Boltzmann. L'objet d'étude des boltzmanniens est un système individuel, constitué d'un nombre grand mais fini de constituants microscopiques. Par contraste, dans le cadre de l'approche de Gibbs, l'objet d'étude est ce qu'on appelle un *ensemble*, i.e. une collection infinie non dénombrable de systèmes indépendants qui sont tous gouvernés par le même hamiltonien mais distribués parmi différents états. Gibbs introduit ce concept de la façon suivante :

On peut imaginer un grand nombre de systèmes de même nature, différant cependant par leurs configurations et vitesses instantanées, et ce non seulement de façon infinitésimale, mais de telle sorte à comprendre toute combinaison concevable de configuration et vitesse. Et ici on peut poser le problème non pas comme celui qui consiste à suivre un système particulier et ses configurations successives, mais plutôt comme celui consistant à déterminer comment la totalité des systèmes est distribuée parmi les différentes configurations et vitesses concevables au temps voulu, étant donné la distribution sur un certain intervalle de temps. (Gibbs, 1902, V)

Les systèmes constituant les ensembles sont des fictions ou, pour le dire comme Schrödinger (1952, 3), des « copies mentales du système particulier considéré » ; ils n'interagissent pas entre eux, chacun ayant sa propre dynamique, et ils ne sont pas situés dans l'espace et le temps. Par conséquent, il est important de ne pas confondre ces ensembles avec les collections d'objets microscopiques tels que les molécules de gaz. L'ensemble correspondant à un gaz constitué de, disons, n molécules consiste en une infinité de copies du gaz *en son entier* (et donc des n molécules).

Considérons maintenant un ensemble de systèmes. L'état d'un des systèmes de l'ensemble à un instant donné est donné par un point de l'espace des phases. L'état de l'ensemble *dans son entier* est, par conséquent, donné par une fonction de densité ρ sur l'espace des phases du système. La fonction ρ est alors considérée comme une densité de probabilité, reflétant la probabilité de trouver un système, choisi au hasard parmi tous ceux de l'ensemble, dans un état se situant dans une région R de Γ , telle que $\rho(R) = \int_R \rho \, d\Gamma$. Prenons un exemple pour rendre les choses plus faciles à concevoir. Imaginons que vous jouez à un genre un peu particulier de jeu de fléchettes :

vous clouez un tableau au mur et vous savez (pour une raison ou pour une autre) que la distribution de probabilité du point d'impact de la fléchette sur le tableau est donnée par la courbe représentée par la figure 6. On vous demande alors quelle est la probabilité que votre fléchette ait son point d'impact sur la partie gauche du tableau. La réponse est $\frac{1}{2}$, puisque la moitié de la surface située sous la courbe ρ se trouve sur la partie gauche du tableau (et l'intégrale de ρ sur une région donnée n'est autre que la surface qui se trouve sous la courbe dans cette région). Dans le cadre de MS, R joue le rôle d'une portion particulière du tableau (dans notre exemple, la moitié gauche), et ρ est la probabilité non pas qu'une fléchette y trouve son point d'impact, mais que s'y trouve un système.

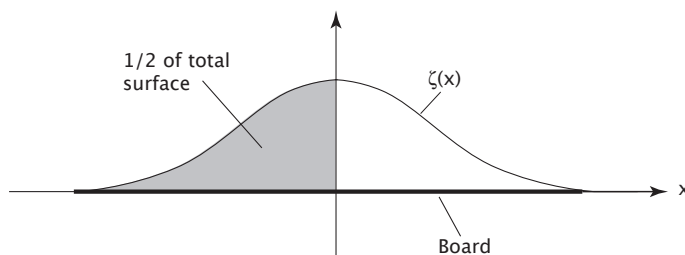


Figure 6. Distribution de probabilité du point d'impact des fléchettes sur le tableau

Ce qui est important ici est qu'on peut calculer des valeurs espérées. Supposons que le jeu est tel que vous gagniez une livre si la fléchette finit dans la moitié gauche, et trois livres si elle atteint la partie droite. Quel est votre gain moyen ? La réponse est : $\frac{1}{2}$ multiplié par 1 livre + $\frac{1}{2}$ multiplié par 3 livres = 2 livres. C'est là la valeur espérée. Et cela marche de la même façon dans le cadre de MS en général. Les grandeurs physiques comme, par exemple, la pression, sont associées à des fonctions f sur Γ , avec lesquelles on calcule les valeurs espérées, qui en général sont données par : $\overline{f} = \int_{\Gamma} f \rho dT$. Ces valeurs espérées, dans le cadre de MS, aussi appelées *moyennes phasiques*, ou *moyennes d'ensemble*, sont d'une importance cruciale du fait que, selon l'un des postulats centraux de MS dans l'approche de Gibbs, ces valeurs ne sont autres que celles observées expérimentalement. Ainsi, si l'on veut user du formalisme pour faire des prédictions, on doit d'abord parvenir à déterminer la distribution de probabilité ρ , puis trouver la fonction f correspondant à la grandeur physique à laquelle on s'intéresse, et enfin calculer la moyenne phasique. Aucune de ces étapes n'est aisée en pratique, et les physiciens passent une bonne part de leur temps à faire ces calculs. Cependant, les difficultés de cet ordre ne nous intéressent pas ici.

Étant donné que les grandeurs observables sont associées aux moyennes phasiques, et que l'équilibre est défini comme l'état dans lequel les paramètres macroscopiques caractérisant le système restent constants, il est naturel de prendre pour condition nécessaire de l'équilibre la stationnarité de la distribution, puisqu'une



distribution stationnaire donne des moyennes constantes. C'est pourquoi Gibbs donne le nom de « condition d'équilibre statistique » à la stationnarité.

Les distributions qui, parmi les distributions stationnaires, satisfont une condition supplémentaire, appelée « principe d'entropie maximale de Gibbs », jouent un rôle particulier. L'entropie de Gibbs (parfois appelée « entropie d'ensemble ») est définie comme $S_G(\rho) = -k_B \int_{\Gamma} \rho \log(\rho) d\Gamma$. Le principe d'entropie maximale de Gibbs exige que $S_G(\rho)$ soit maximale, étant donné les contraintes qui sont imposées au système.

Cette dernière clause est ici importante du fait que différentes contraintes font que sont sélectionnées différentes distributions. On choisit communément de fixer l'énergie et le nombre de particules du système : $E = \text{const}$ et $n = \text{const}$ (tout en supposant que l'étendue du système dans l'espace est finie). On peut montrer que, dans ces circonstances, $S_G(\rho)$ est maximale quand la distribution est ce qu'on appelle la « distribution microcanonique » (ou « ensemble microcanonique »), c'est-à-dire la distribution qui est uniforme sur l'hypersurface d'énergie $H(p,q) = E$ et nulle partout ailleurs. Si on choisit de conserver un nombre de particules constant et de laisser l'énergie fluctuer autour d'une certaine valeur moyenne, on obtient ce qu'on appelle la distribution canonique ; si on laisse le nombre de particules fluctuer autour d'une certaine valeur moyenne, on se trouve avec ce qu'on appelle « l'ensemble grand-canonique¹ ».

Ce formalisme connaît un énorme succès, dans la mesure où on peut en dériver des prédictions correctes pour un grand nombre de systèmes. Cela dit, le succès de ce formalisme est pour le moins intrigant. La première question qui vient immédiatement à l'esprit est celle de la relation entre les systèmes et les ensembles. Dans l'approche de Gibbs, la probabilité de distribution est définie sur un ensemble, le formalisme offre des moyennes d'ensemble, et l'équilibre est conçu comme la propriété d'un ensemble. Pourtant, c'est le comportement d'un unique système qui nous intéresse. Comment les propriétés d'un ensemble, entité fictive constituée d'une infinité de copies d'un système, peuvent-elles nous dire quoi que ce soit concernant le système réel, celui qui est sur la table du laboratoire ? Plus précisément encore, pourquoi des moyennes sur un ensemble coïncident-elles avec les valeurs obtenues lors des mesures faites sur le système physique actuel en état d'équilibre ? La raison de tout ceci est loin d'être immédiate.

Voici l'explication que l'on peut trouver dans les manuels concernant les moyennes phasiques. Comme nous l'avons vu, le formalisme de Gibbs associe les grandeurs physiques avec des fonctions f définies sur l'espace des phases du système. Or conduire une expérience pour mesurer l'une de ces grandeurs prend du temps. Ce que les appareils de mesure enregistrent n'est donc pas la valeur instantanée de la fonction en question, mais plutôt sa moyenne sur le temps de la mesure ; de là, la possibilité d'un accès empirique aux moyennes temporelles. L'argument continue

1. Voir Tolman (1983, chap. 3 et 4), par exemple, pour plus de détails.



ainsi : bien qu'à l'échelle humaine le temps de mesure soit court, il est très long comparé aux échelles de temps microscopiques caractérisant les processus moléculaires. C'est pourquoi la valeur qui est de fait mesurée est approximativement égale à la moyenne de la fonction mesurée sur un temps *infini*. Supposons enfin que le système est ergodique. Dans ce cas, les moyennes temporelles sont égales aux moyennes phasiques, et ces dernières peuvent facilement être calculées grâce au formalisme. Nous avons donc trouvé le lien que nous cherchions : le formalisme de Gibbs fournit des moyennes phasiques qui, du fait de l'ergodicité, sont égales aux moyennes temporelles sur un temps infini, qui sont, à leur tour, de bonnes approximations des moyennes temporelles obtenues lors de la mesure sur un intervalle de temps fini.

Cet argument pose problème au moins pour deux raisons. Premièrement, du simple fait que les mesures prennent du temps, on ne saurait conclure que les valeurs mesurées sont bien des moyennes temporelles. Nous avons donc besoin d'un argument pour défendre la thèse selon laquelle ce que les mesures fournissent sont bien des moyennes temporelles. Deuxièmement, même si on admet que les mesures fournissent bien des moyennes temporelles, assimiler ces moyennes à des moyennes temporelles sur un temps infini reste problématique. Même si le temps de la mesure est très long (ce qui n'est pas le cas le plus souvent, vu que les mesures ne prennent de fait pas beaucoup de temps), les moyennes finies et infinies peuvent prendre des valeurs différentes. Or l'appel à l'infini est ici crucial : si on remplace les moyennes sur un temps infini par des moyennes sur un temps fini (quelle que soit la longueur de la période considérée comme pertinente), alors le théorème d'ergodicité ne vaut plus et l'argument tombe.

Ces critiques semblent définitives et nous poussent à trouver une nouvelle stratégie d'explication. Trois propositions peuvent être avancées. Du fait de l'espace alloué, nous ne pourrons pas en offrir une discussion détaillée ici et nous nous contenterons donc d'un bref exposé des idées principales – nous renvoyons le lecteur à la note 3 pour des références offrant une discussion plus étendue de la question.

Malament et Zabell (1980) proposent une première façon d'expliquer le succès de la théorie à l'équilibre qui invoque toujours l'ergodicité mais ne fait pas appel aux moyennes temporelles. Cela permet d'éviter les problèmes mentionnés ci-dessus, mais soulève aussi une autre difficulté qui est que, parmi les systèmes auxquels le formalisme de MS s'applique avec succès, beaucoup ne sont pas ergodiques. Afin de contourner cette difficulté, Vranas (1998) a proposé de remplacer l'ergodicité par ce qu'il appelle l' ϵ -ergodicité. Pour faire simple, un système est dit ϵ -ergodique s'il est ergodique non pas sur l'ensemble, mais sur une très large portion de l'espace des phases. L'idée principale à l'origine de cette approche est de récuser la conception commune selon laquelle si un système est « légèrement » non ergodique, alors il se comportera de façon complètement non ergodique. Vranas remarque qu'il existe un entre-deux, et soutient que cet entre-deux est tout ce dont on a besoin. C'est là une proposition prometteuse, mais il lui reste trois défis à relever. D'abord, il reste à montrer que tous les systèmes en question sont ϵ -ergodiques. Ensuite, l'argument

n'a pour l'instant été défendu que dans le cadre de l'ensemble microcanonique, et on voudrait savoir s'il s'applique aussi bien aux ensembles canoniques et grand-canoniques. Enfin, cette approche est toujours fondée sur l'idée que l'état d'équilibre est caractérisé par une distribution stationnaire, ce qui, comme nous allons le voir plus bas, constitue un obstacle à toute formulation d'une théorie gibbsienne hors équilibre.

La seconde proposition est née avec les travaux de Khinchin. Khinchin (1949) a remarqué que les problèmes liés au programme ergodique étaient en grande partie dus au fait qu'une classe trop générale de systèmes y était prise en considération. Plutôt que d'étudier les systèmes dynamiques d'un point de vue général, nous devrions, selon Khinchin, nous concentrer sur les seuls cas qui sont pertinents en mécanique statistique. Cela implique deux restrictions sur le type de systèmes considérés. Premièrement, seuls les systèmes avec un grand nombre de degrés de liberté sont traités ; deuxièmement, seule une certaine catégorie de fonctions phasiques, appelées « fonctions sommes » – en gros, les fonctions qui sont des sommes de fonction à une particule –, doivent être prises en compte. Avec ces hypothèses en place, Khinchin est parvenu à montrer que, quand n devient grand, la mesure des régions de l'hypersurface d'énergie E sur lesquelles la différence entre les moyennes sur le temps et sur l'espace n'est pas petite, tend vers zéro. En gros, ce résultat montre que, pour les n grands, le système se comporte, à toute fin pratique, comme un système ergodique.

Le problème qui se pose est que ce résultat ne vaut que pour les fonctions sommes, et en particulier que si le hamiltonien lui-même est une fonction somme, ce qui n'est en général pas le cas. La question est donc de savoir si ce résultat peut être généralisé à des cas plus réalistes. Cette question est à l'origine d'un programme de recherche connu désormais sous le nom de « limite thermodynamique », dont Lanford, Ruelle et Van der Linden, parmi d'autres, se sont faits les champions (voir Van Lith (2001) pour une étude d'ensemble). La question principale qui se pose au sein de ce programme est celle de savoir si l'on peut obtenir des résultats similaires à celui de Khinchin dans le cas d'hamiltoniens possédant des termes d'interaction. Des résultats de ce type peuvent être prouvés quand n et le volume V du système tendent vers l'infini, de telle sorte que le rapport du nombre de molécules sur le volume n/V reste constant.

Les deux programmes évoqués jusqu'à maintenant sont muets quant à la question de l'interprétation des probabilités. Posons-nous alors la question : comment comprendre les probabilités dans ces théories ? Deux possibilités se présentent immédiatement. La première est une forme de fréquentisme. Une façon commune de concevoir les ensembles, et qui est proposée par Gibbs lui-même, est de les voir comme analogues à des urnes, qui, au lieu de contenir des balles de différentes couleurs, contiennent des systèmes dans différents micro-états. La distribution p donne alors la fréquence avec laquelle on obtient un système dans un état donné, quand on « tire » un système de l'ensemble. Malgré les apparences, cette proposition pose

problème. Les ensembles ne sont pas des urnes desquelles on peut « tirer » des systèmes au hasard ! Ils sont des constructions imaginaires, et ce que veut dire « tirer un système de l'ensemble » est – au mieux – loin d'être clair.

La seconde façon d'interpréter les probabilités est de les interpréter comme des moyennes temporelles. Cela marche pour autant que le système est ergodique. Le problème principal est que cela empêche toute extension du programme aux situations en dehors de l'équilibre (dont nous allons parler ci-dessous). Interpréter les probabilités comme des moyennes sur des temps infinis donne des probabilités stationnaires. Résultat : les moyennes phasiques sont constantes. C'est bien ce à quoi on s'attend à l'équilibre, mais cela ne permet pas de comprendre pourquoi nous sommes témoins de changements d'état des systèmes physiques, pourquoi nous observons des systèmes approcher l'équilibre depuis des états de non-équilibre. Une telle évolution doit se refléter dans une modification de la distribution de probabilité, ce qui est, par définition, impossible si la distribution est stationnaire.

La troisième proposition part d'un certain malaise concernant la façon dont les deux premières traitent des probabilités. On nous enjoint ici d'adopter une interprétation épistémique des probabilités. Ce point de vue remonte à Tolman (1938) et a été développé jusqu'à devenir une approche globale de MS par Jaynes au travers d'une série d'articles réunis dans son (1983). Au cœur de l'approche de Jaynes se trouve une reconceptualisation radicale de ce qu'est MS. De son point de vue, MS ne dit quelque chose que de *notre connaissance du monde*, et non pas du monde lui-même. La distribution de probabilité représente l'état de notre connaissance du système considéré et non pas certains états de faits concernant le système lui-même. Plus précisément, la distribution représente notre ignorance du micro-état du système étant donné son macro-état ; et, en particulier, l'entropie devient une mesure quantitative de notre manque de connaissance.

Afin de donner une base solide à sa proposition, Jaynes utilise l'entropie de Shannon (1949) ainsi que l'appareil de théorie de l'information qui l'accompagne¹. L'idée centrale est que nous devrions toujours choisir la distribution qui correspond à un niveau maximal d'incertitude, *i.e.* maximale neutre concernant l'information manquante. Puisque, dans le cas continu, l'entropie de Shannon prend la même forme mathématique que l'entropie de Gibbs, il suit immédiatement de cela que nous devons choisir la distribution qui maximise l'entropie de Gibbs, ce qui est exactement ce que le formalisme nous prescrit de faire !

Cela est impressionnant, mais il faut reconnaître que l'application de la notion d'entropie telle que définie en théorie de l'information à MS est lourdement controversée, la question centrale étant celle de savoir pourquoi il est rationnel de choisir un état d'entropie élevée en l'absence d'information pertinente². De plus, interpréter

-
1. Voir Cover & Thomas (1991) pour une discussion détaillée.
 2. On trouvera une discussion de cette question dans Denbigh & Denbigh (1985), Lavis & Milligan (1985, sect. 5), Shimony (1985), Uffink (1995a, 1996a), Howson & Urbach (2006, 276-288).

l'entropie comme représentant notre connaissance plutôt qu'une propriété du système a pour conséquence pour le moins contre-intuitive que l'entropie et l'équilibre ne sont plus des propriétés du système mais plutôt de notre situation épistémique.

Jusqu'ici, nous avons traité du cas de l'état d'équilibre. Tournons-nous maintenant vers la question de savoir si l'approche de l'équilibre peut être traitée dans le cadre du point de vue de Gibbs. Malheureusement, des obstacles apparemment insurmontables se dressent. Le premier de ces obstacles est tout simplement qu'une des conséquences du formalisme est que l'entropie de Gibbs est constante ! Ceci exclut la possibilité de caractériser l'approche de l'équilibre en termes d'augmentation de l'entropie de Gibbs, ce qui aurait pourtant été la façon la plus naturelle de faire, si l'entropie de Gibbs devait être considérée comme la grandeur de MS correspondant à l'entropie thermodynamique.

Le second problème tient à la caractérisation de l'équilibre dans les termes d'une distribution stationnaire. De fait, la forme mathématique des équations hamiltoniennes du mouvement qui gouvernent le système est telle qu'elle interdit toute évolution depuis un état non stationnaire vers un état stationnaire : si, à un certain moment du temps, la distribution est non stationnaire, alors elle restera non stationnaire à tout instant, et inversement, si, à un certain moment du temps, la distribution est stationnaire, c'est qu'elle est stationnaire depuis toujours. C'est ainsi que la caractérisation de l'équilibre en termes de distributions stationnaires contredit le fait que certains systèmes n'étant pas initialement en état d'équilibre puissent se rendre à l'équilibre. Il devrait apparaître maintenant très clairement que toute caractérisation de l'équilibre en termes de distributions stationnaires est réduite à l'absurde par cet argument.

Ainsi, le défi le plus important que la théorie gibbsienne du non-équilibre doit relever est de trouver un moyen de faire bouger l'entropie de Gibbs et de caractériser l'équilibre, de telle sorte que ne soit pas exclue toute possibilité de changement pour le système. Cela peut être accompli de façons variées, et de fait il existe une pléthore d'approches fournissant des solutions toutes différentes, entre autres : les théories de la sélection grossière (« *coarse graining* »), de l'interventionnisme, de la dynamique stochastique, de l'école de Bruxelles, et de la hiérarchie BBGKY ; il n'est pas possible de parler de toutes ces théories dans le cadre de cet article introductif et je renvoie le lecteur aux travaux mentionnés en note 3 pour des présentations accessibles.

Terminons cette section par une remarque sur le réductionnisme. Les problèmes conceptuels liés au réductionnisme mentionnés plus haut surgissent également dans le cadre de l'approche de Gibbs. Et certains autres problèmes, ceux-là propres à l'approche de Gibbs, s'ajoutent à la liste.

Boltzmann a emprunté à TD l'idée que l'entropie et l'équilibre étaient des propriétés des systèmes individuels, et a sacrifié l'idée que l'équilibre (ainsi que les valeurs associées de l'entropie) était stationnaire. Gibbs a fait le choix inverse : il a conservé la stationnarité de l'équilibre, mais en a payé le prix en faisant que l'entropie et l'équilibre deviennent des propriétés des ensembles et non des systèmes individuels.

Ceci du fait que l'entropie et l'équilibre sont tous deux définis en termes de distributions de probabilité ρ , définie elle-même sur un ensemble et non pour un système individuel. Puisqu'un système particulier peut être membre d'ensembles différents, on ne peut plus dire qu'un système individuel est en équilibre. Ce caractère « ensembliste » se retrouve pour toute grandeur physique, en particulier pour la température, qui est aussi une propriété d'un ensemble et non d'un système individuel.

Cela est problématique parce que l'état d'un système individuel peut changer considérablement au cours du temps, alors même que la valeur moyenne de l'ensemble ne change pas du tout ; on ne peut donc rien inférer sur le comportement d'un système individuel depuis le comportement d'un ensemble. Pourtant, ce sont bien à des systèmes individuels que nous avons affaire dans le cadre expérimental ; du coup, le passage aux ensembles est jugé par beaucoup comme n'étant pas une stratégie adéquate (voir Callender (1999), par exemple).

Il faut cependant noter que Gibbs lui-même n'a jamais prétendu avoir réduit TD à MS, et ne voulait parler que d'« analogies thermodynamiques » concernant les relations entre TD et MS. La notion d'analogie est certes plus faible que celle de réduction, mais la question reste au mieux ouverte de savoir si c'est bien là un avantage ou non. Si l'analogie est fondée sur des propriétés purement algébriques de certaines variables, alors il n'est pas évident que MS contribue à une meilleure compréhension des phénomènes thermaux ; si l'analogie est plus que simplement formelle, alors au moins certains des problèmes qui se posent concernant la réduction reviendront à la surface.

5. Conclusion

Même si tous les problèmes inhérents aux approches de Boltzmann et de Gibbs pouvaient être résolus, il resterait encore une difficulté majeure : l'existence même de deux cadres différents. L'un des problèmes principaux des fondements de MS est bien le manque de consensus quant au formalisme à utiliser, et on peut dire que cela conduit à une forme de schizophrénie. Le formalisme de Gibbs a un domaine d'application plus étendu et, de ce fait, est celui dont font usage les physiciens dans la pratique. En fait, pratiquement toutes les applications de MS sont fondées sur la machinerie gibbsienne. Malgré l'importance de ce succès pratique, l'idée que le formalisme de Gibbs n'explique en rien pourquoi MS « marche » est devenue de plus en plus consensuelle au cours des dix dernières années, et il est maintenant admis que, dès lors que l'on s'attaque à des questions sur les fondements de MS, on se doit d'adopter l'approche de Boltzmann (voir Lavis, 2005, et les références qui s'y trouvent). Ainsi, à chaque fois que la question se pose de savoir pourquoi MS rencontre le succès, on donne une explication en termes boltzmanniens.



Nous nous trouvons donc dans une situation étrange où un formalisme sert à répondre aux questions concernant les fondements, et un autre aux applications pratiques. Cela ne serait pas trop déroutant si on pouvait traduire un formalisme dans l'autre, ou s'ils étaient en un sens ou un autre équivalents (comme le sont par exemple, les représentations de Schrödinger et de Heisenberg en mécanique quantique). Le problème est que, comme nous l'avons vu plus haut, ce n'est absolument pas le cas. Les deux approches sont en désaccord total quant à la définition de l'objet d'étude, de l'équilibre, de l'entropie, et sur de nombreux autres points encore. Ainsi, même dans l'hypothèse où toutes les difficultés internes propres à chacune des approches étaient résolues de façon satisfaisante, il resterait encore à comprendre les relations qui existent entre les deux.

Lavis (2005) a récemment fait une proposition quant à l'éventuelle réconciliation des deux approches. Il propose, de façon radicale, d'abandonner tout simplement la notion d'équilibre, cette notion étant binaire, puisque les systèmes sont soit en état d'équilibre soit en dehors de l'équilibre, et de la remplacer par une propriété continue de « *commonness* ». La question de savoir si une telle stratégie est justifiée et/ou permettra de résoudre le problème, reste posée pour la recherche à venir.

