

# Autour du théorème $H$ de Boltzmann

## Réversibilité, irréversibilité et simulations numériques

par **Pierre ADROGUER**  
Lycée Gustave Eiffel - 21000 Dijon  
pierre-michel-c.adroguer@ac-dijon.fr

ON SE PROPOSE DANS CET EXPOSÉ d'étudier un paradoxe de la physique statistique : alors que le second principe de la thermodynamique nous permet de définir sans équivoque une direction pour l'écoulement du temps lors de l'évolution d'un système thermodynamique réel, la description microscopique des interactions entre particules est, elle, totalement réversible. Ce paradoxe a été levé par Ludwig Boltzmann qui a démontré en 1872 le théorème  $H$ , énonçant qu'un « système macroscopique isolé évolue spontanément vers son état d'équilibre ». Ainsi, pour un système de particules subissant des collisions élastiques (donc réversibles au niveau microscopique), il existe une grandeur macroscopique  $H(t)$  qui varie de manière monotone, ce qui brise l'invariance par renversement du temps. On modélisera donc en Python l'évolution d'un gaz bidimensionnel de sphères dures, en partant d'une situation initiale loin de l'équilibre, on regardera l'évolution de cette grandeur  $H$ , qui se trouve bien évidemment être l'entropie, et donc notée  $S$  par la suite.

### 1. MODÈLE ÉTUDIÉ

On considère un ensemble de particules identiques classiques (non quantiques), de rayon  $R$  et de masse  $m$ , astreintes à se déplacer dans un plan  $Oxy$ . Les interactions entre particules seront modélisées par des collisions élastiques de disques durs, il n'y a donc pas d'interactions à longue portée. Cette approximation est valable dans le cas d'un gaz de particules lorsque l'on néglige les interactions lumière-matière (donc en l'absence d'absorption ou d'émission de lumière due à l'excitation ou la désexcitation d'atomes) et les modes de rotation ou vibration des molécules [1].

#### 1.1. Description des collisions

Pour décrire la collision de deux disques durs, on va se placer dans le référentiel du centre de masse de ce système de deux particules. Dans ce référentiel, les vitesses des deux particules sont opposées.

Le référentiel du centre de masse est galiléen, le système formé de deux particules étant isolé. L'application du principe fondamental de la dynamique ainsi que de la

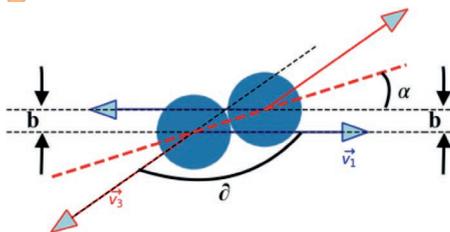
conservation de l'énergie cinétique (puisque la collision est élastique) fournissent deux relations qui ne garantissent seulement que les vitesses des particules après collision ont la même norme qu'avant la collision, leur direction étant inconnue. Toutefois, cette direction peut être déterminée en utilisant le fait qu'en l'absence de frottement, la variation de quantité de mouvement de chaque particule ne peut être que dans la direction donnée par la droite joignant les centres des deux disques. Ainsi cette droite est la bissectrice externe des deux droites portées par les vitesses avant et après collision de chaque particule.

Il est alors nécessaire d'introduire le paramètre d'impact  $b$  donnant la distance minimale d'approche entre les centres des particules *si la collision n'avait pas eu lieu*. Par définition, s'il y a eu collision, alors  $b \leq 2R$ . Ce paramètre d'impact est lié à l'angle  $\alpha$  entre la direction des vitesses avant collision et la droite liant les deux centres des disques par la relation  $\sin \alpha = b/2R$ .

On peut alors montrer que chaque particule est déviée, dans le référentiel barycentrique, d'un angle :

$$\vartheta = \pi \pm 2\alpha = \pi \pm 2 \arcsin \frac{b}{2R}.$$

Ainsi, la vitesse de chaque particule dans le référentiel barycentrique est connue, et il est aisé de revenir au référentiel du laboratoire en ajoutant à nouveau la vitesse du centre de masse.



**Figure 1** - (a) Schéma de la collision entre deux particules dans le référentiel barycentrique pour un paramètre d'impact  $b=0,6R$  - (b) Schéma agrandi de la même collision au moment de l'impact. La droite pointillée rouge est celle joignant le centre des deux disques.

La description de cette collision est réversible par construction : en effet, les deux droites portées par les vecteurs vitesses des particules après l'impact sont elles aussi séparées d'une distance égale au paramètre d'impact. À ce niveau, les équations du mouvement pour une particule sont elles-mêmes réversibles, soit que l'on considère le principe fondamental de la dynamique (la dérivée de l'accélération étant invariante par renversement du temps en tant que dérivée seconde), ou la conservation de l'énergie mécanique puisque la seule force considérée dérive d'un potentiel : le potentiel d'interaction subi par la particule  $i$  étant une somme de potentiels créés par chaque particule

$j \neq i$  (chaque potentiel étant infini dans la région voisine de  $R$  de la particule  $j$ , et nul en dehors).

Plus généralement, les équations d'Euler-Lagrange obtenues pour un système isolé (comme celui étudié ici) ne font apparaître que des dérivées secondes par rapport au temps, elles sont donc invariantes par renversement du temps, ce qui assure la réversibilité de la collision étudiée [2].

## 1.2. Évolution de l'entropie

En thermodynamique, l'entropie est une *fonction d'état*, ce qui signifie que cette grandeur n'est définie qu'à l'équilibre d'un système [3]. Toutefois, la physique statistique propose une définition de l'entropie (évidemment compatible avec la définition thermodynamique) un peu plus générale selon :

$$S = -k_B \sum_{(l)} p_l \ln - (p_l)$$

dans laquelle  $(l)$  désigne l'ensemble des micro-états du système (l'ensemble des états microscopiques qu'il peut prendre, caractérisés par la donnée des positions et vitesses de chaque particule) et  $\{p_l\}$  la distribution de probabilité de ces micro-états.

On pourrait alors calculer  $S$  en modélisant l'évolution du gaz de sphères dures un grand nombre de fois et d'utiliser l'hypothèse ergodique afin de déterminer ces probabilités (en assimilant moyenne temporelle pour une évolution et moyenne d'ensemble pour un grand nombre d'évolutions). Cette solution serait très chronophage, c'est pourquoi une autre approche a été adoptée [4-5].

Pour le gaz qui nous intéresse, on découpe le système des  $N$  particules en plusieurs petits sous-systèmes composés chacun uniquement de particules d'énergies voisines. On définit donc un ensemble discret de valeurs de l'énergie séparées de  $\partial E$ , et on compte pour chaque sous-système le nombre  $n_j$  de particules dont l'énergie  $E$  est telle que  $j \partial E \leq E \leq (j+1) \partial E$ . Vu le modèle retenu, l'énergie de chaque particule est son énergie cinétique, car elles sont sans interactions en dehors des collisions. On calcule alors l'entropie comme :

$$S = -k_B \sum_j n_j \ln \left( \frac{n_j}{N} \right).$$

Le choix de la constante multiplicative avant la somme est en principe indifférent, mais on choisit de la prendre égale à la constante de Boltzmann afin d'assurer la cohérence de cette définition avec l'entropie thermodynamique.

## 1.3. Principe suivi pour la simulation numérique (Python)

On considère  $N$  particules dans une enceinte, sans se soucier de son volume. La répartition des particules est considérée comme uniforme, donc on ne va pas garder en

mémoire les positions des particules. Chaque particule est donc uniquement repérée par sa vitesse.

Pour l'état initial, on choisit un état volontairement loin de l'équilibre : un état où toutes les particules ont la même énergie cinétique (toutes les particules ont une norme de la vitesse identique  $v_0$ , et les directions sont choisies aléatoirement) alors qu'à l'équilibre, l'énergie des particules doit suivre une distribution de probabilité exponentielle, la probabilité pour une particule d'avoir l'énergie  $E$  étant proportionnelle à  $\exp(-E/k_B T)$ .

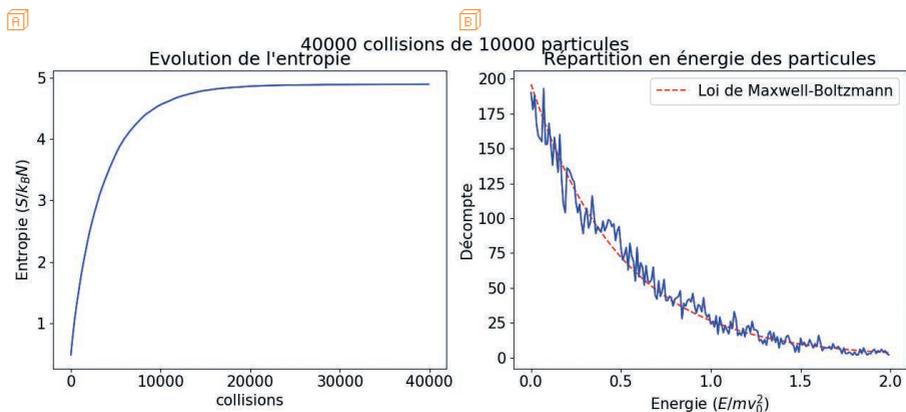
À chaque itération, deux particules différentes sont tirées au sort, ainsi qu'un paramètre d'impact (plus précisément, une valeur aléatoire de  $b/(2R)$  entre  $-1$  et  $1$ ). On réalise alors la collision entre ces deux particules, et les nouvelles vitesses sont réaffectées aux particules. On calcule alors l'entropie à chaque étape en fixant un paramètre  $d$  fixant des sous-systèmes d'énergies de taille  $\partial E = mv_0^2/d$ .

## 2. RÉSULTATS OBTENUS

### 2.1. Système isolé

Dans un premier temps, on étudie l'évolution d'un grand nombre de particules isolées de l'extérieur, il n'y a pas d'échanges avec l'extérieur, on s'attend donc à ce que la variation d'entropie soit positive. De plus, la situation de départ étant hors équilibre, on s'attend à une variation strictement positive.

On lit à la figure 2 la courbe obtenue pour l'évolution de l'entropie (divisée par  $k_B N$ ) pour un système composé de dix mille particules effectuant quarante mille collisions, ainsi que la distribution en énergie des particules à la fin de l'expérience.



**Figure 2** - A Evolution de l'entropie (divisée par  $k_B N$ ) d'un système isolé composé de dix mille particules au cours de quarante mille collisions - B Répartition en énergie (en unité de  $mv_0^2$ ) des dix mille particules après les quarante mille collisions.

On remarque tout d'abord comme attendu une croissance stricte de l'entropie, donc l'évolution est bien irréversible. On remarque que cette croissance est d'abord très rapide, avant d'atteindre un plateau pour environ quarante mille collisions. On retrouve ainsi un résultat de la littérature [6] pour lequel l'équilibre d'un gaz est atteint après une dizaine de fois le temps de libre parcours moyen d'une particule. En effet, après quarante mille collisions, chaque particule a subi en moyenne huit chocs.

Il peut être intéressant de calculer un ordre de grandeur du temps nécessaire pour arriver à cet équilibre.

Dans des conditions usuelles, si l'on considère un volume  $1 \text{ m}^3$  d'air à pression  $P=1 \text{ bar}$  et à température  $T=3 \times 10^2 \text{ K}$ , la quantité de matière est de l'ordre de  $4 \times 10 \text{ mol}$ , donc une densité particulaire  $n \sim 10^{25}$  particules /  $\text{m}^3$ .

On peut prendre comme ordre de grandeur  $R$  d'une particule le nanomètre (taille typique d'une molécule), et pour la vitesse moyenne la vitesse du son, donc  $v \sim 3 \times 10^2 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ . On cherche alors à savoir au bout de combien de temps  $t_c$  le volume balayé par la particule est tel qu'il contient en moyenne une particule : on doit avoir  $R^2 \cdot v t_c \cdot n \sim 1$  donc

$$t_c \sim \frac{1}{R^2 \cdot v \cdot n} \sim 10^{-10} \text{ s.}$$

Ainsi, avec ces valeurs correspondant aux conditions standards, notre modèle (bidimensionnel) prévoit que l'équilibre est atteint en un temps de l'ordre de la nanoseconde !

On voit dans la figure de droite que comme attendu, l'équilibre correspond à une répartition des particules selon leur énergie conforme à la loi de Maxwell-Boltzmann, c'est-à-dire que la probabilité pour une particule d'avoir l'énergie  $E$  est proportionnelle à  $\exp(-E/k_B T)$ , où l'on a pris  $k_B T$  égal à l'énergie cinétique moyenne des particules (monoatomiques) puisqu'elles n'ont que deux degrés de liberté de translation.

## 2.2. Système en contact avec un thermostat

On suppose maintenant un gaz dans une situation d'équilibre à la température  $T_1$ , et on décide de le mettre en contact avec un thermostat à la température  $T_2$ . La méthode choisie consiste à tirer aléatoirement un des deux événements suivants :

- ◆ une collision entre une particule du système et le thermostat ; pour modéliser cette collision, on va simplement supposer que la particule entre en collision avec une particule identique, dont la vitesse sera tirée aléatoirement conformément à une distribution de Maxwell-Boltzmann à la température  $T_2$ , et ce avec une probabilité  $p$  ;
- ◆ une collision entre deux particules comme précédemment avec une probabilité  $1 - p$ .

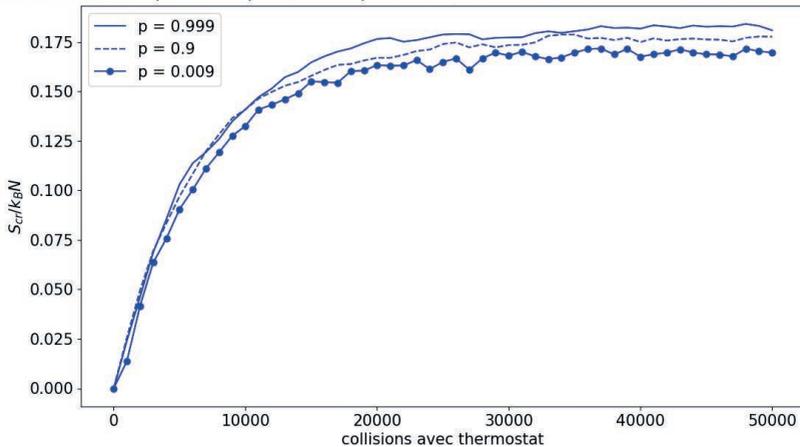
La probabilité avec laquelle l'un ou l'autre des événements arrive est fonction uniquement de la concentration en particules, de la taille caractéristique de l'enceinte

$L$  et de la taille des particules : pendant un temps infinitésimal  $dt$ , la particule a une probabilité de rencontrer une paroi de l'ordre de  $v dt/L$ , et celle de rencontrer une autre particule  $n \cdot (2R) \cdot v dt$ . Le rapport entre ces deux grandeurs donne la probabilité  $p$  recherchée :

$$p = \frac{1}{\ln(2R)} = \frac{L}{2NR}.$$

Toutefois, la quantité intéressante pour déterminer l'évolution de l'entropie du système n'est que le nombre de collisions des particules avec les parois, comme le montre la figure 3 où différentes valeurs de  $p$  sont utilisées pour tracer l'évolution de l'entropie en fonction du nombre de collisions des particules avec les parois et où les courbes se superposent, montrant la non-pertinence de ce paramètre pour cette étude.

Evolution de l'entropie créée pour 10000 particules effectuant 50000 collisions avec le thermostat



**Figure 3** - Évolution de l'entropie créée (divisée par  $k_B N$ ) pour un système initialement à la température  $T_1$  composé de dix mille particules effectuant cinquante mille collisions avec un thermostat à la température  $T_2 = 2T_1$ .

### 2.2.1. Évolution de l'entropie

On effectue alors l'évolution de dix mille particules initialement à la température  $T_1$  en contact avec un thermostat à la température  $T_2 = 2T_1$ , en considérant cent mille collisions de particules (entre elles ou avec le thermostat) et on trace la variation d'entropie, toujours calculée comme  $S = -k_B \sum_j n_j \ln\left(\frac{n_j}{N}\right)$ . On effectue aussi la même étude pour un système initialement à l'équilibre à la température  $T_2$  et en contact avec un thermostat à  $T_1$ .

On obtient les évolutions de la figure 4 (cf. page ci-contre).

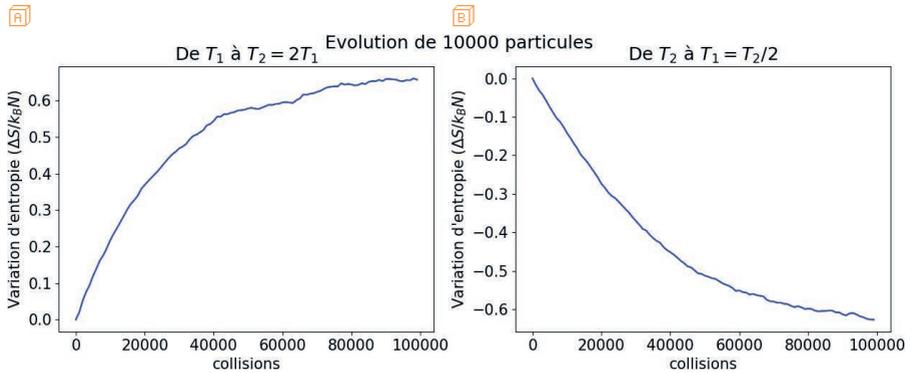


Figure 4 - **A**) Variation de l'entropie (divisée par  $k_B N$ ) d'un système composé de dix mille particules au cours de cent mille collisions de  $T_1$  à  $T_2 = 2T_1$  - **B**) Même courbe pour une évolution de  $T_2$  à  $T_1$ .

On remarque que, lors du refroidissement, l'entropie diminue, ce qui pourrait sembler être en contradiction avec le second principe de la thermodynamique. Toutefois, ce principe ne s'applique qu'à un système isolé, or dans cette étude, le système n'est plus isolé puisqu'il échange de l'énergie avec l'extérieur sous forme de chaleur. Puisque l'extérieur est à la température  $T_{ext}$  fixée, l'entropie échangée est  $S_{ech} = \Delta E / T_{ext}$ , où l'on a noté  $\Delta E$  la variation d'énergie du système. On effectue alors une nouvelle simulation dans laquelle on trace la variation d'entropie, l'entropie échangée  $S_{ech} = \Delta E / T_{ext}$  (l'énergie du système étant la somme des énergies cinétiques de chaque particule, la variation se calcule aisément) et l'entropie créée  $S_{cr} = \Delta S - S_{ech}$ . On trouve à la figure 5 les résultats obtenus et on s'aperçoit alors que dans les deux cas, l'entropie créée est strictement positive : il y a bien comme attendu irréversibilité

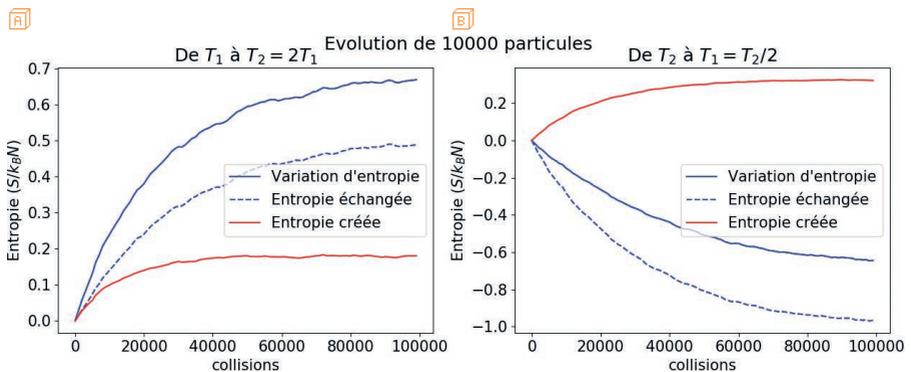


Figure 5 - **A**) Variations de l'entropie, de l'entropie échangée et de l'entropie créée (divisées par  $k_B N$ ) d'un système composé de dix mille particules au cours de cent mille collisions de  $T_1$  à  $T_2 = 2T_1$  - **B**) Mêmes courbes pour une évolution de  $T_2$  à  $T_1$ .

lors de la mise en contact d'un système à la température  $T$  avec un thermostat à une température différente.

On s'intéresse maintenant à la compatibilité des résultats de ces simulations avec ce qui est attendu en thermodynamique, en assimilant le modèle à un gaz de Van der Waals régi par l'équation d'état  $(P + a N^2/V^2) \cdot (V - Nb) = N k_B T$ , dans lequel on identifie les coefficients  $a=0$  (pas d'interactions entre particules) et  $b = \pi R^2$  (covolume). L'entropie à l'équilibre est alors [7] :

$$S(T, V, N) = N \left[ s_0 + c_V \ln T + R \ln \frac{V - Nb}{N} \right].$$

On en déduit donc que la variation d'entropie pour le système initialement à l'équilibre à la température  $T_i$  porté à la température  $T_f$  doit être  $\Delta S = N c_V \ln(T_f/T_i)$  puisque le volume et le nombre de particules sont fixés.

Dans cette expression,  $c_V$  est comme habituellement la capacité calorifique molaire à volume constant. Pour un gaz de Van der Waals, elle est égale à celle du gaz parfait, donc on obtient ici simplement  $c_V = k_B$  puisqu'il n'y a que deux degrés de liberté.

Ainsi, on s'attend à ce que  $\Delta S/(k_B N) = \ln(T_f/T_i)$  pour les simulations que nous avons effectuées. Pour les valeurs  $T_2 = 2 T_1$ , on attend donc les valeurs de

$$\frac{\Delta S}{k_B N} = \pm \ln 2 \approx \pm 0,69,$$

ce qui correspond bien aux valeurs obtenues.

On peut de même déterminer l'entropie créée  $S_{cr} = \Delta S - S_{ech}$ , or

$$S_{ech} = \frac{\Delta E}{T_f} = \frac{N k_B T}{T_f},$$

donc l'entropie créée doit être telle que :

$$\frac{S_{cr}}{N k_B} = \ln \frac{T_f}{T_i} - 1 + \frac{T_i}{T_f}.$$

En posant  $x = T_i/T_f$ , on trouve

$$\frac{S_{cr}}{N k_B} = x - 1 - \ln x \geq 0$$

comme attendu, le cas d'égalité étant pour  $x=1$ , donc  $T_f = T_i$ . Les valeurs attendues pour  $x=1/2$  ou 2 sont respectivement 0,19 et 0,31, en cohérence avec les valeurs obtenues par les simulations numériques.

### 2.2.2. Augmentation du nombre de thermostats

Un exercice classique de thermodynamique est la démonstration que pour l'évolution d'un gaz à l'équilibre de la température  $T_i$  jusqu'à la température  $T_f$ , la création d'entropie est diminuée à mesure que plus de thermostats intermédiaires sont utilisés,

avec la limite d'une évolution réversible ( $S_{cr} = 0$ ) quand le nombre de thermostats utilisés tend vers l'infini.

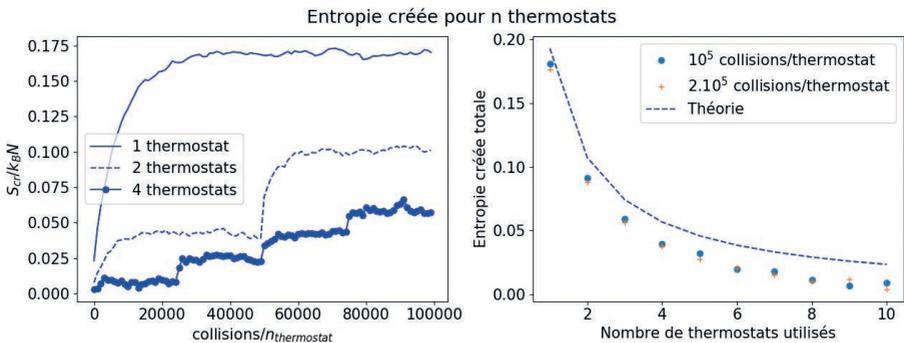
On a donc essayé de vérifier que ce résultat tient toujours avec le modèle utilisé et tracé (cf. figure 6) l'entropie créée pour l'évolution de dix mille particules évoluant de  $T_i$  à  $T_f = 2T_i$  :

- ◆ avec un seul thermostat à  $T_f$  ;
- ◆ avec deux thermostats à  $\sqrt{2} T_i$  et  $T_f$  ;
- ◆ avec quatre thermostats à  $2^{1/4} T_i$ ,  $\sqrt{2} T_i$ ,  $2^{3/4} T_i$  et  $T_f$ .

Avec  $n$  thermostats dont les températures sont en progression géométrique de raison  $2^{1/n}$ , l'entropie créée est théoriquement :

$$S_{cr} = k_B N n (2^{-1/n} - 1 + \ln 2^{1/n}) = k_B N (n 2^{-1/n} - n + \ln 2).$$

On a donc évalué l'entropie créée (moyenne sur cinq simulations) au cours de l'évolution avec  $n$  thermostats ( $n$  allant de 1 à 10) pour un système composé de cinq mille particules (cf. figure 6) et les résultats obtenus sont confrontés aux prédictions théoriques.



**Figure 6 -** Entropie créée pour un doublement de la température d'un système de dix mille particules avec respectivement un, deux ou quatre thermostats - Entropie créée en moyenne pour  $n$  ( $n$  entre 1 et 10) thermostats pour un système de cinq mille particules dont la température est doublée.

Bien que la tendance générale soit respectée, il y a écart entre les résultats des simulations numériques et la théorie qui pourrait s'expliquer par plusieurs raisons, qui n'ont pas été explorées en détail :

- ◆ le nombre de collisions n'est pas suffisant pour que l'équilibre soit atteint (paraît peu cohérent puisque les résultats ne sont pas sensiblement différents en doublant le nombre de collisions) ;

- ◆ le nombre de simulations avant de faire la moyenne pourrait être trop petit (cinq seulement). Mais tous les résultats sont inférieurs à l'expression théorique alors que si c'était le cas, ils devraient être répartis de part et d'autre ;
- ◆ le nombre de particules dans chaque intervalle d'énergie est trop faible pour que la moyenne soit pertinente. Il faudrait alors plus de particules (mais le temps de calcul devient trop important) ou diminuer le pas de quantification des énergies (mais la précision sur le calcul de  $S$  en pâtit).

Dans tous les cas, on retrouve bien une diminution de l'entropie créée lorsque le nombre de thermostats  $n$  augmente. Toutefois, cette meilleure performance du chauffage (en termes d'entropie créée) est contrebalancée, comme attendu, par une perte de performance en termes de puissance : entre l'état initial et l'état final, l'énergie transférée au système est toujours  $\Delta E = k_B N \Delta T$ , mais le temps nécessaire à l'évolution est le temps nécessaire à l'équilibre avec un thermostat multiplié par le nombre de thermostats, donc la puissance moyenne varie en  $1/n$ .

### 3. DISCUSSIONS

Le théorème  $H$  de Boltzmann a été fortement critiqué dans les années suivant son énoncé en 1872. En particulier, il soulève deux paradoxes souvent nommés paradoxes de la réversibilité qu'il est intéressant de discuter afin de comprendre les ordres de grandeur et les échelles de temps mis en jeu.

#### 3.1. Paradoxe de Loschmidt

En 1876, Johann Josef Loschmidt, peu convaincu de la réalité du théorème  $H$  ne pouvait concevoir qu'une succession de collisions réversibles pouvait conduire à une irréversibilité. Selon lui, pour une situation hors équilibre donnée, puisque les équations de la mécanique sont réversibles au niveau microscopique, si l'on inverse (théoriquement) toutes les vitesses des particules, alors en remontant l'évolution précédente à l'envers, on doit aboutir à une diminution de l'entropie créée, en contradiction avec le théorème  $H$ .

La réponse de Ludwig Boltzmann fut particulièrement cinglante puisqu'il aurait déclaré « Allez-y, retournez-les alors ! », signifiant par là qu'il est impossible pour un système macroscopique constitué d'un nombre considérable de particules d'effectuer cette inversion des vitesses pour ces dernières. Deux comportements de la physique, alors inconnus à l'époque permettent, ensemble, de résoudre le paradoxe :

- ◆ tout d'abord, la physique quantique, et en particulier le principe d'indétermination de Heisenberg, nous a appris qu'il est impossible de déterminer avec une précision infinie la position et la quantité de mouvement d'une particule ;

- ◆ l'étude des systèmes chaotiques nous a quant à elle montré la sensibilité des solutions d'un problème (même complètement déterministe) aux conditions initiales : deux systèmes obéissant aux mêmes lois préparés dans des conditions initiales proches peuvent après un certain temps avoir des caractéristiques totalement différentes [8].

On comprend donc que même s'il était possible de prendre un système évoluant vers l'équilibre et que l'on inversait les vitesses de toutes les particules, même si au début de l'évolution, la grandeur pourrait diminuer, la divergence des solutions assure elle, qu'au bout d'un certain temps (très court en pratique), la solution « réelle » diverge tellement de la solution « parfaitement inversée » qu'elle voit son entropie créée augmenter.

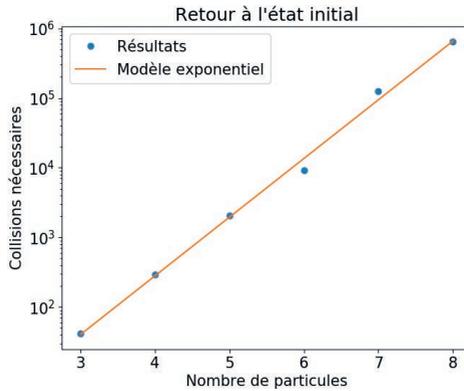
### 3.2. Paradoxe de Zermelo

Le mathématicien Ernst Zermelo a été à l'origine en 1896 d'un autre paradoxe en utilisant le théorème de récurrence de Poincaré. Ce théorème stipule que lors de l'évolution d'un système dynamique conservatif dans un espace des phases de taille finie, presque toutes les conditions initiales sont telles qu'au cours de l'évolution, la trajectoire du système est dense dans l'espace des phases, donc que l'on doit repasser aussi près que possible de la situation de départ.

Ernst Zermelo remarque alors que l'application de ce théorème au cas de la cinétique des gaz est en contradiction avec le théorème  $H$  de Boltzmann : au bout d'un certain temps  $t_C$ , le système est quasiment revenu à sa position initiale à l'instant  $t_0$  donc on doit avoir  $H(t_C) \approx H(t_0)$ , en contradiction avec la monotonie de la fonction  $H$ .

La solution apportée par Boltzmann fut d'estimer le temps nécessaire pour qu'une telle situation se produise. Ce temps est selon Ernst Boltzmann en  $10^N$ , et avec  $N$  de l'ordre du nombre d'Avogadro, bien plus grand que l'âge de l'Univers de l'ordre de  $10^{17}$  s.

On peut vérifier très approximativement ce résultat en utilisant le programme pour un système isolé de  $N$  particules et renvoyant le nombre de collisions nécessaire à ce que l'entropie retrouve sa valeur initiale. En faisant une valeur moyenne sur vingt expériences, et en prenant pour valeur du pas du calcul de l'intégration sur l'énergie la faible valeur  $d=5$ , on trouve les résultats de la figure 7 (cf. page ci-après), montrant bien l'évolution exponentielle en  $N$  du temps d'attente. La régression linéaire fournit même une approximation du nombre de collisions nécessaires  $n_{col} = e^{aN+b}$  avec  $a \approx 1,94$ . On peut donc estimer le temps nécessaire pour que le système de dix mille particules étudié revienne proche de la situation initiale à  $e^{19400} \sim 10^{8541}$  collisions, donc bien impossible à observer en pratique.



**Figure 7** - Évolution du nombre moyen de collisions nécessaires à l'obtention d'une configuration de même entropie que l'entropie initiale en fonction du nombre de particules du système.

## CONCLUSION

Comme nous l'avons vu, le théorème  $H$  de Boltzmann va à l'encontre du sens commun : les équations de la mécanique étant réversibles, comment l'irréversibilité peut-elle émerger quand on considère un grand nombre de particules ? Grâce à quelques simulations numériques aisément accessibles en *Python*, il est possible de relier ces évolutions réversibles à l'évolution de l'entropie, ce qui permet de voir l'émergence de l'irréversibilité dans les cas les plus simples. Dans cette étude, l'irréversibilité trouve son origine dans le tirage aléatoire des particules et des paramètres, mais même un programme sans variables aléatoires verrait l'irréversibilité émerger, ne serait-ce qu'à cause des erreurs d'arrondis [9]. Plus fondamentalement, la démonstration du théorème  $H$  exige cette perte d'information en considérant la fonction de distribution à  $N$  particules comme un produit de fonctions de distribution à une particule [5].

Nous avons aussi vu que l'ordre de grandeur de la durée nécessaire à ce que cet aléa amène à une situation très loin de l'équilibre est hors d'atteinte dès que le nombre de particules dépasse quelques dizaines, il semblerait donc que la célèbre phrase de Philip Warren Anderson « *More is different* » se voit à nouveau justifiée.

Je remercie Baptiste Bourget, Sylvain Carrozza, Antonin Coutant et Vincent Démery pour leurs retours et discussions, et Olivier Clémence, Nicolas Estrampes et Solenn Vaupré pour leur relecture attentive.

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] R. Feynmann, R. Leighton and M. Sands, *The Feynmann lectures on Physics*, Basic books, 2011.

- [2] L. Landau et E. Lifchitz, *Mécanique*, Mir-Ellipses, 1994.
- [3] R. Balian, *Entropy, a Protean Concept*, Séminaire Poincaré, 2003.
- [4] L. Landau et E. Lifchitz, *Physique statistique*, Mir, 1967.
- [5] N. Pottier, *Physique statistique hors d'équilibre : équation de Boltzmann, réponse linéaire*, Notes de cours DEA de physique du solide, 1997-1998.
- [6] B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer et B. Roulet, *Physique statistique*, Hermann, 2001.
- [7] I. Prigogyne et D. Kondepui, *Thermodynamique, des moteurs thermiques aux structures dissipatives*, Odile Jacob, 1999.
- [8] E. Lorenz, "Deterministic nonperiodic flow," *Journal of the Atmospheric Sciences*, vol. 20, p. 130-141, January 1963.
- [9] R. Jullien, «De la réversibilité microscopique à l'irréversibilité macroscopique : une expérience numérique illustrative», *Bull. Un. Phys.*, vol. 88, n° 768, p. 1481-1493, novembre 1994.



**Pierre ADROGUER**

*Professeur*

Lycée Gustave Eiffel

Dijon (Côte d'Or)