1 Systèmes macroscopiques. Loi des grands nombres.

1.1 Descriptions macroscopique et microscopique

En physique, on peut distinguer deux types de systèmes:

- Macroscopique : le nombre de particules N $\gg 1$. Dals l'expérience quotidienne, N est très grand, N $\sim$ N_A, le nombre d'Avogadro $(6.02 \cdot 10^{23}$, nombre de particules dans un gramme d'Hydrogène).
- Microscopique : Le nombre de particules N est de l'ordre de l'unité.

Les lois macroscopiques mettent en jeu un petit nombre d'observables telles que la pression P, la densité ρ, la température T, etc, qui sont bien définies par l'expérience. Un exemple en est la loi des gaz parfaits: $P = \rho K_B T, \quad \rho = \frac{N}{V}$.

Les grandeurs macroscopiques sont *sans fluctuations.* Néanmoins, ces grandeurs sont le résultat de l'effet d'un très grand nombre d'actions microscopiques, par exemple la pression d'un gaz sur une paroi résulte d'un grand nombre de collisions entre les particules du gaz et cette paroi.

La question qu'on se pose est donc la suivante : comment faire le lien entre la description microscopique et les lois macroscopiques ?

Une description strictement microscopique est impossible pour plusieurs raisons:

1. Résoudre les équations de Newton ou d'Hamilton pour 10^{23} particules couplées.
2. Spécifier les solutions correspondant aux conditions initiales.

Il faut donc avoir recours à d'autres méthodes de nature probabiliste et statistique.

1.2 Loi des grands nombres

La description probabiliste produit des grandeurs macroscopiques (moyennes) bien définies (pression, température, ...) et non-fluctuantes. La raison en est la loi des grands nombres.

1.2.1 Définitions :

Soit X une variable aléatoire. on définit :

- **L'espérance mathématique** $\langle x \rangle = \sum_x P(x) \cdot x$: la somme pondérée de tous les résultats possibles, chacun étant affecté d'un poids égal à sa fréquence d'apparition.
- **La variance** de X = $\left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$
- **L'écart quadratique moyen** (l'écart-type) = la racine carrée de la variance = $\sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

N.B. : Les grandeurs macroscopiques dont on a parlé sont des moyennes, donc des espérances mathématiques, et les fluctuations correspondent aux écart quadratiques moyens.

1.2.2 Loi des grands nombres :

Si l'on répète un grand nombre de fois et de façon indépendante une même expérience aléatoire, qui a comme résultat une valeur numérique, alors la moyenne des résultats obtenus tend à se rapprocher de l'espérance mathématique de l'expérience. En d'autres termes :

$$\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} X_i \underset{N\to\infty}{\to} \left\langle \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} X_i \right\rangle = \langle X_i \rangle = \langle X \rangle$$

1.3 Un exemple simple

Soient N particules ponctuelles indiscernables et indépendantes dans un volume V, $N \gg 1$. La densité de particules est donc $\rho = \frac{N}{V}$.

On suppose que les positions des particules dans V sont inconnues, et on fait alors l'hypothèse que toutes les positions sont équiprobables.

On prend un sous-volume Λ de V, alors la probabilité de trouver une particule dans Λ est $p = \frac{\Lambda}{V}$, $q = 1 - p$ étant la probabilité de trouver une particule à l'extérieur de Λ.

Le nombre k de particules dans Λ est une variable aléatoire: donc $\rho_\Lambda = \frac{k}{\Lambda}$, qui correspond à la densité de particules dans le sous-volume Λ est aussi une variable aléatoire.

- La probabilité de trouver k particules dans Λ

$$P_{N,V,\Lambda}(k) = \frac{N!}{k!(N-k)!} p^k q^{N-k}$$

  suit la loi binomiale.

- Le nombre moyen de particules dans Λ

$$\langle k \rangle = \sum_{k=0}^{N} k \cdot P_{N,V,\Lambda}(k) = N \cdot p = \rho \cdot \Lambda$$

- Donc la densité moyenne est égale à celle du gaz dans V :

$$\langle \rho_\Lambda \rangle = \frac{\langle k \rangle}{\Lambda} = \rho$$

- La fluctuation du nombre de particules vaut

$$\sqrt{\left\langle (k - \langle k \rangle)^2 \right\rangle} = \sqrt{Npq}$$

- et celle de la densité

$$\sqrt{\left\langle (\rho_\Lambda - \langle \rho_\Lambda \rangle)^2 \right\rangle} = \frac{\sqrt{Npq}}{\Lambda} = \langle \rho_\Lambda \rangle \cdot \sqrt{\frac{q}{Np}} \sim \frac{1}{\sqrt{N}}$$

Conclusion : L'écart moyen rapporté à la moyenne vaut

$$\frac{\sqrt{\left\langle(\rho_\Lambda - \langle\rho_\Lambda\rangle)^2\right\rangle}}{\langle\rho_\Lambda\rangle} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\frac{V}{\Lambda} - 1}$$

et est de l'ordre de $\frac{1}{\sqrt{\langle k\rangle}}\left(\sim \frac{1}{\sqrt{N}}\right)$

Pour un système macroscopique, Si $N \sim 10^{23}$, $V \sim 1dm^3, \Lambda \sim 1cm^3$, alors $\frac{\Lambda}{V} \sim 10^{-3}$ donc $\langle k\rangle \sim 10^{20}$ et les fluctuations relatives $\sim 10^{-10}$ sont **macroscopiquement inobservables**.

1.4 Limite thermodynamique, comparaison avec la loi normale (théorème de la limite centrale)

Bien que les configurations de particules disposées au hasard dans le volume V soient très erratiques, on peut obtenir des lois de distribution statistique simples dans une situation limite appelée limite thermodynamique: comme N est grand, on idéalise la situation en calculant les quantités d'intérêt dans la limite $N \to \infty, V \to \infty$, avec la densité $\rho = \frac{N}{V}$ finie et fixée.

Voici un exemple : pour Λ fixé,

$$\lim_{N\to\infty} P_{N,V,\Lambda}(k) = \frac{(\rho\Lambda)^k}{k!}e^{-\rho\Lambda} := P_\lambda(k)$$

avec $\lambda := \rho\Lambda$.On reconnaît la statistique de Poisson de paramètre λ. On a évidemment que $\sum_{k=0}^{\infty} P_\lambda(k) = 1$.

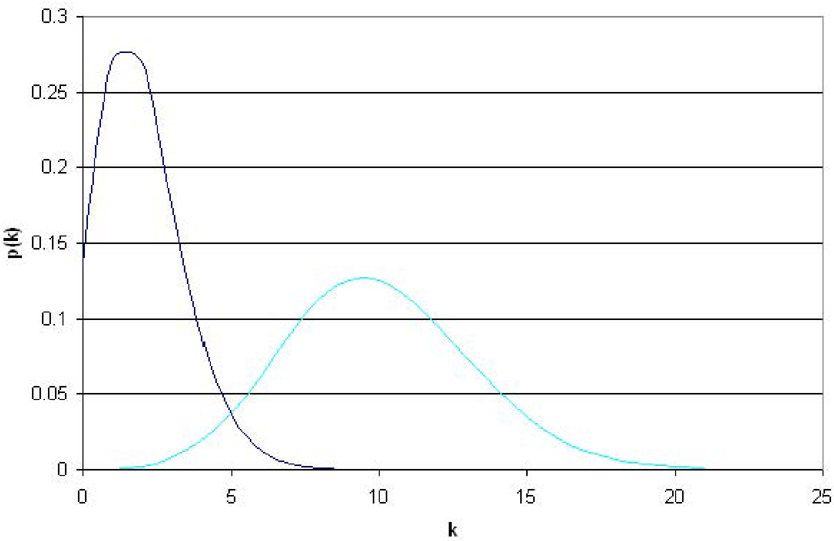
Voici un rappel de quelques propriétés de cette statistique :

L'espérance $\langle k\rangle = \sum_{k\geq 0} k \cdot P_\lambda(k) = \lambda$

La variance $\langle(k-\lambda)^2\rangle = \sum_{k\geq 0}(k-\lambda)^2 \cdot P_\lambda(k) = \lambda$

L'écart quadratique moyen est donc $\sqrt{\lambda}$

Ci-dessous on présente le graphe de la distribution pour $\lambda = 2$, ainsi que pour $\lambda = 10$



Dans ce deuxième cas, la distribution se centre sur λ. Remarquez que la largeur du pic croît comme $\sqrt{\lambda}$ (l'écart quadratique moyen), ce qui veut dire que l'écart relatif devient de plus en plus petit, quand le paramètre λ devient de plus en plus grand.

Rappel: la densité de probabilité de la loi normale centrée en a et d'écart-type σ est

$$P_{\sigma,a}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(x-a)^2}{2\sigma}}$$

Afin de comparer la loi normale avec la loi de poisson $P_\lambda(k)$ dans le cas $\lambda \to \infty$, on centre et on normalise cette dernière de la façon suivante : on introduit la variable $x = \frac{k-\lambda}{\sqrt{\lambda}}$, ainsi :

- $\langle x \rangle = \frac{\langle k \rangle - \lambda}{\sqrt{\lambda}} = 0$
- $\left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle = \langle x^2 \rangle = \frac{\left\langle (k-\lambda)^2 \right\rangle}{\lambda} = 1$
- pour chaque incrément unité de k, la variable x est augmenté de $\frac{1}{\sqrt{\lambda}}$, donc pour $\lambda \to \infty$, la distribution devient continue, et les somme $\sum_{k \geq 0}$ sont remplacées par $\sqrt{\lambda} \cdot \int_{-\infty}^{\infty} dx$

On peut ensuite vérifier que

$$\tilde{P}(x) := \sqrt{\lambda} \cdot P_\lambda \left(\lambda + x\sqrt{\lambda} \right) \underset{\lambda \to \infty}{\to} P_{1,0}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

(Une façon intuitive de voir les choses est de dire que $P_\lambda(k) \to \frac{1}{\sqrt{2\pi\lambda}} e^{-\frac{(k-\lambda)^2}{2\lambda}}$, puis de remplacer $\frac{(k-\lambda)^2}{\lambda}$ par x^2)

Ce résultat n'est qu'un cas particulier du théorème de la *Limite Centrale* **:** soient X_i un ensemble de N variables aléatoires indépendantes identiquement distribuées, d'espérence μ et de variance σ^2 finies, alors la loi de la variable aléatoire $Y_N := \frac{1}{\sqrt{N\sigma^2}} \sum_{i=1}^{N} (X_i - \mu)$ tend vers celle de la loi normale

$$\lim_{N \to \infty} P(Y_N = x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}}$$

1.5 Conclusions

- L'écart-type de la somme d'un grand nombre N de contributions indépendantes est proportionnel à $\sqrt{N}$, et l'écart relatif est donc proportionnel à $\frac{1}{\sqrt{N}}$. Donc les fluctuations des grandeurs macroscopiques (pression, densité, ...) sont très petites et inobservables.
- La statistique des fluctuations approche la distribution normale quand $N \to \infty$.