

Emergences en physique statistique

Roger Balian

Académie des Sciences

IPhT, Centre de Saclay, 91191 Gif-sur-Yvette Cx

La physique statistique est l'une des branches les plus foisonnantes de la physique théorique contemporaine. Au cours du XX^e siècle, le développement de la microphysique a conduit à une unification des interactions fondamentales et mis en évidence la simplicité formelle des lois à l'échelle microscopique. Ces découvertes ont renforcé l'attitude réductionniste, basée sur l'idée que dans un système composé d'objets élémentaires il n'y a « rien de plus » que ces éléments et leurs relations mutuelles. On admet donc que les lois macroscopiques, *complexes et spécifiques*, peuvent s'expliquer à partir des lois microscopiques, *simples et unifiées* ; c'est seulement le très grand nombre de constituants qui entraîne l'apparition de propriétés nouvelles. Ce genre de déduction est le but même de la physique statistique, qui est donc le domaine par excellence de l'émergence.

Etant donné que les propriétés qualitatives d'un système composite sont susceptibles de différer radicalement de celles de ses constituants élémentaires, il a été difficile d'admettre qu'elles pourraient en découler. Au XVIII^e siècle, Maupertuis soulève la question de l'émergence dans son *Système de la Nature, essai sur la formation des corps organisés* : « Une attraction uniforme et aveugle, répandue dans toutes les parties de la matière, ne saurait servir à expliquer comment ces parties s'arrangent pour former le corps dont l'organisation est la plus simple. Si toutes ont la même tendance, la même force pour s'unir les unes aux autres, pourquoi celles-ci vont-elles former l'œil, pourquoi celles-là l'oreille ? pourquoi ce merveilleux arrangement ? et pourquoi ne s'unissent-elles pas toutes pêle-mêle ? ». Il en conclut : « Jamais on n'expliquera la formation d'un corps organisé par les seules propriétés physiques de la matière. » Dans la seconde partie du XIX^e siècle, la théorie cinétique, premier avatar de la physique statistique, a permis d'expliquer et même de prévoir de nombreuses propriétés des gaz en admettant qu'ils étaient constitués de nombreuses molécules pouvant entrer en collision. Pourtant elle a eu les plus grandes difficultés à s'imposer. Jusqu'à la mise en évidence expérimentale directe des atomes et molécules, il semblait en effet impensable que la matière ne fût pas continue à l'échelle microscopique comme elle l'est à la nôtre.

Depuis, le champ de la physique statistique n'a cessé de s'étendre. Nous avons appris qu'à l'échelle de 10^{-10} m la matière est simplement constituée de noyaux atomiques et d'électrons, caractérisés par leur masse et leur charge,

interagissant deux à deux par des forces coulombiennes (auxquelles il faut adjoindre pour certains phénomènes des forces magnétiques) et gouvernés par les règles de la mécanique quantique. Notre but est alors de déduire *de ces seules lois* microscopiques, simples et bien établies, les comportements divers à notre échelle, qu'ils soient mécaniques, thermiques, électromagnétiques ou optiques, des toutes sortes de matériaux, fluides, cristallins, amorphes, plastiques ou autres. Toute la chimie et même la biologie sont d'ailleurs censées découler de cette microphysique. Un tel type de compréhension déductive est aussi couramment recherché pour d'autres systèmes composés de nombreux constituants élémentaires. Ainsi, des techniques de physique statistique ont été appliquées à l'optique quantique où le grand nombre de constituants est celui des photons, aux noyaux en tant qu'assemblées de protons et de neutrons, à la biologie pour comprendre par exemple des comportements collectifs, et même à la cosmologie en considérant l'Univers comme une assemblée de galaxies en interaction gravitationnelle.

Même en se limitant au passage de l'échelle atomique à notre échelle, la physique statistique a permis de comprendre l'émergence de nombreux phénomènes, et d'expliquer l'existence de différences qualitatives majeures entre ces deux échelles. Le lecteur pourra se reporter au traité de R. Balian, *From Microphysics to Macrophysics, Methods and Applications of Statistical Physics* (Volumes I et II, Springer 2007). Nous nous contenterons ici d'énumérer quelques uns des succès obtenus.

1. La matière nous apparaît comme *continue* alors que sa structure microscopique est discrète. Il nous semble aujourd'hui évident, comme ce l'était au XVIII^e siècle, qu'il n'y a aucune contradiction entre ces deux propriétés. Mais les progrès au XIX^e siècle de la thermodynamique, de l'électromagnétisme, de la théorie des ondes et de la physique des fluides avaient imposé une conception continue de la matière, ce qui a conduit au rejet de l'atomisme.

2. Des grandeurs comme l'*énergie* subissent des métamorphoses entre une échelle et l'autre. L'énergie, simple fonction des variables microscopiques qui reste constante au cours du mouvement, prend à notre échelle des formes diverses selon l'objet et le phénomène considérés : chaleur, travail, énergies cinétique, potentielle, chimique, électrique, etc. ; son caractère conservatif garde la trace de sa propriété microscopique. Ces aspects protéiformes de l'énergie à notre échelle expliquent pourquoi ce concept a été si difficile à dégager : le premier principe de la thermodynamique n'a été reconnu qu'au milieu du XIX^e siècle alors que Carnot a énoncé le deuxième en 1824 ; le mot « énergie » dans son acception scientifique ne date que de 1875 (« energy » en anglais avait été introduit en 1852).

3. Les *grandeurs physiques* microscopiques se réduisent à la position et la vitesse des particules constitutives (ainsi que leur moment cinétique intrinsèque,

appelé « spin », qui intervient pour les matériaux magnétiques). Les grandeurs physiques courantes émergent du passage à notre échelle et sont nombreuses. Certaines apparaissent comme des valeurs moyennes : densité, pression, vitesse hydrodynamique, courant électrique, aimantation, concentration d'un soluté, etc. D'autres ont une nature statistique cachée : l'entropie mesure le désordre microscopique, la température caractérise la distribution de probabilité qui régit le système à l'équilibre. D'autres encore dérivent des précédentes et sont associées à des propriétés spécifiques : capacité calorifique, compressibilité, résistivité, viscosité, etc. Toutes ces grandeurs sont collectives, elles n'ont aucun équivalent microscopique et n'existent qu'en raison du grand nombre des constituants.

4. La physique statistique doit faire appel à des *probabilités* pour deux raisons. D'une part, la mécanique quantique, qui régit à l'échelle microscopique tout objet, est irréductiblement probabiliste. (Nous reviendrons sur ce point.) D'autre part, on souhaite étudier un objet complexe, ce qui impose de toute façon l'utilisation de probabilités : Décrire dans le détail un système particulier de ce type est inimaginable, de sorte que l'on cherche les propriétés générales d'un *ensemble* de systèmes, placés dans les mêmes conditions macroscopiques et présentant des différences à l'échelle microscopique. Les prévisions sont donc entachées d'incertitudes. Cependant, à notre échelle, la physique est *déterministe*. Afin de lever cette contradiction, il faut comprendre pourquoi le caractère probabiliste inhérent à notre description microscopique disparaît à l'échelle macroscopique. Ceci résulte encore de l'immensité du nombre N des constituants (le nombre d'Avogadro est de 6.10^{23} particules par mole). La loi des grands nombres implique alors que la fluctuation statistique relative d'une grandeur collective soit de l'ordre de $1/\sqrt{N}$, donc négligeable. Alors que les variables microscopiques, positions et vitesses des particules, présentent des fluctuations statistiques importantes, les grandeurs macroscopiques énumérées ci-dessus prennent (ou semblent prendre) des valeurs bien définies.

5. Dans la perspective réductionniste de la physique statistique, la *thermodynamique* est détrônée en tant que science fondamentale : ses « principes » apparaissent comme de simples conséquences des lois microscopiques. Le premier principe repose sur l'interprétation des diverses formes macroscopiques de l'énergie en termes de l'énergie microscopique. Le deuxième principe, lui, découle du « principe de raison insuffisante » de Laplace, selon lequel on doit attribuer des probabilités égales à des événements sur lesquels on ne dispose d'aucune information. On démontre alors (R. Balian et N. Balazs, *Ann. Phys.* 179 (1987) 97) que l'entropie statistique, objet mathématique qui mesure l'incertitude associée à la loi de probabilité résultante, s'identifie à l'entropie de la thermodynamique, et que celle-ci doit être maximale dans un état d'équilibre : c'est précisément la forme que Callen a donnée à l'énoncé du deuxième principe.

6. Appliquée non plus de façon générale mais à des matériaux et des phénomènes particuliers, à l'équilibre ou hors d'équilibre, la physique statistique permet de comprendre l'origine microscopique de très nombreuses *lois empiriques* : équations d'état, chaleurs spécifiques des gaz ou des solides, loi de Hooke de l'élasticité, susceptibilité magnétique en $1/T$, loi d'action de masse, équation de la chaleur, loi d'Ohm, équations de Navier–Stokes, lois de la cinétique chimique, etc. Pour des matériaux suffisamment simples, on peut même évaluer les coefficients empiriques figurant dans ces lois, par exemple des viscosités, des conductivités, des coefficients thermoélectriques ou de diffusion.

7. Les lois dynamiques macroscopiques sont le plus souvent *non linéaires*, alors que l'équation d'évolution de la physique quantique est linéaire. Une non linéarité peut ainsi émerger de la linéarité.

8. Autre différence qualitative radicale, l'émergence de l'*irréversibilité* à longterm a été considérée comme un paradoxe. A notre échelle, la plupart des évolutions mettent en évidence une « flèche du temps » : un frottement ralentit un objet en mouvement, les températures de deux corps au contact tendent à s'égaliser, un sucre se dissout dans l'eau, un processus spontané inverse étant interdit. Pourtant, la dynamique microscopique est réversible : le changement de sens du temps n'affecte en rien les équations du mouvement des particules constitutives. Là encore, c'est le grand nombre de ces dernières qui permet de comprendre pourquoi la probabilité d'observer des évolutions aberrantes, « remontant le temps », est pratiquement nulle, tout au moins sur des durées raisonnables. Il est mathématiquement remarquable, et souvent difficile à prouver, que des équations d'évolution réversibles puissent engendrer des irréversibilités macroscopiques.

9. Les lois microscopiques sont invariantes sous l'effet de certaines opérations, par exemple une rotation ou une symétrie (comme dans un miroir). Pourtant, dans de nombreux matériaux, on observe la violation d'une telle invariance. Un cristal, ou un échantillon ferromagnétique, ne sont pas invariants par rotation. Un cristal de quartz diffère de son image dans son miroir, de même que toute matière vivante. La compréhension de telles *brisures de symétrie* est un thème important de physique statistique.

10. Une *transition de phase* telle que la fusion de la glace se manifeste comme un brusque changement d'état induit par une variation continue de température. Ce phénomène a pendant longtemps été considéré comme reflet macroscopique d'un changement microscopique : beaucoup pensaient que les forces d'interaction intermoléculaires étaient différentes dans les deux phases, de sorte que la fusion de la glace, par exemple, serait due à une modification de ces forces engendrée par l'élévation de température. Il semblait paradoxal qu'un matériau puisse changer d'état sans modification des lois microscopiques. Un pas conceptuel décisif a été franchi par Lars Onsager, qui a résolu en 1944 un modèle de transition de phase pour lequel le système est ferromagnétique au-dessous d'une certaine température, paramagnétique au-dessus, bien que

l'interaction entre spins reste inchangée lorsque la température varie. Ici encore, c'est le grand nombre de constituants qui autorise ce changement qualitatif.

11. La physique statistique éclaire aussi la théorie des *mesures quantiques*. Une grandeur physique macroscopique prend des valeurs bien définies, tandis qu'en mécanique quantique le concept même de grandeur physique présente des aspects singuliers. La position et la vitesse d'une particule sont représentées mathématiquement non par des nombres ordinaires, mais par des éléments d'une algèbre non commutative. Il en résulte qu'elles ne peuvent ensemble être ni mesurées ni même définies avec précision, qu'elles sont régies par des probabilités incontournables et que leurs fluctuations statistiques doivent être supérieures à une certaine borne (relation d'incertitude de Heisenberg). Plus généralement les probabilités gouvernant les grandeurs microscopiques sont d'un type nouveau, différent des probabilités ordinaires. (Les corrélations quantiques peuvent par exemple violer les inégalités de Bell.) Il existe à l'échelle microscopique des « chats de Schrödinger », c'est-à-dire des objets qui sont à la fois « morts » et « vivants ». Pis encore, la logique quantique obéit à des règles étranges : des assertions séparément vraies peuvent, si on les combine, conduire à une contradiction. Ceci se produit lorsque la théorie quantique interdit de les tester ensemble expérimentalement avec un appareillage unique, bien qu'il soit possible de tester chacune d'elles par des mesures séparées. Une assertion (ou un ensemble d'assertions) n'a donc qu'un sens « contextuel » : dire qu'elle est « vraie » signifie qu'il est permis d'imaginer un certain contexte expérimental où elle serait vérifiable. Cependant, malgré toutes ces étrangetés, chaque mesure quantique fournit un résultat bien défini, sans « chat de Schrödinger ». On peut comprendre ce fait (A. Allahverdyan et al, *Europhys. Lett.* 61 (2003) 452) grâce à la résolution, par des méthodes de physique statistique, d'un modèle d'appareil de mesure, système macroscopique en interaction avec un objet testé. On montre alors que l'appareil enregistre à chaque coup une certaine valeur, et que des mesures successives peuvent fournir des résultats différents régis par une loi de probabilité ordinaire. Ainsi, à notre échelle, *des probabilités et une logique ordinaires émergent* du processus de mesure.

La mécanique statistique permet donc dans de nombreuses circonstances de *comprendre*, de *prévoir* et de *calculer* toutes sortes de phénomènes en se basant sur la théorie microscopique, unifiée, plus fondamentale et plus simple que les théories phénoménologiques basées sur l'expérience macroscopique. Cette recherche d'émergences constitue l'un des moteurs de la recherche, même lorsqu'elle est mise en échec ! Fort stimulante et fructueuse, elle contribue à l'unification conceptuelle des sciences et aide à la découverte, comme on vient de le voir. Dans un autre domaine que la physique statistique, comprendre les liaisons chimiques en traitant les molécules comme édifices d'électrons et de noyaux a grandement facilité la construction de nouveaux composés. Cependant,

la chimie n'en continuera pas moins de constituer une science autonome, car il n'est guère possible d'anticiper les propriétés d'une molécule en se fondant uniquement sur sa constitution élémentaire. De même, la biologie moléculaire ne pourra être vue comme une branche de la chimie.

Plus généralement, comme l'a souligné P. W. Anderson dans son célèbre article *More is Different* (*Science* 177 (1972) 393) dont nous allons reprendre certaines idées, il est illusoire de rêver d'une Science unique qui se déduirait des lois fondamentales microscopiques – bien que celles-ci soient établies avec une quasi certitude et qu'elles devraient en principe suffire pour expliquer le monde à toute échelle. L'étude d'objets de plus en plus complexes fait apparaître de nouvelles sciences, sans que celles-ci soient le prolongement des sciences plus « fondamentales ». Il est certes arrivé que la théorie ait fait émerger d'un niveau inférieur une propriété nouvelle. Maxwell a prédit à l'aide de la théorie cinétique que la viscosité des gaz devait croître avec la température, contrairement à celle des liquides, propriété inattendue que l'expérience a ensuite confirmé. Cependant, de tels succès du « constructionisme » sont rares. Personne n'aurait par exemple imaginé l'existence de quasi-cristaux avant leur découverte macroscopique inattendue ; c'est seulement a posteriori que l'on a réussi à comprendre comment les interactions entre atomes engendraient de pareils objets. Les phénomènes et concepts nouveaux sont en général découverts à leur propre échelle ; afin d'arriver ensuite à les relier à l'échelle inférieure plus fondamentale, on travaille non de bas en haut mais de haut en bas, en expliquant ainsi un phénomène déjà connu, et parfois depuis longtemps.

En effet, le passage d'une échelle inférieure à une échelle supérieure présente souvent des difficultés extrêmes. Il a fallu attendre 1957 pour expliquer à partir de la structure électronique des métaux le phénomène de supraconductivité découvert en 1911, et la théorie des oxydes supraconducteurs à haute température critique n'est pas encore satisfaisante. Le problème de la mesure quantique, posé dès 1925, commence seulement à être résolu. L'eau, matériau pourtant courant, possède une organisation microscopique si complexe que l'on a du mal à expliquer par la physique statistique ses propriétés singulières. Dans le domaine de la botanique, on a observé depuis des siècles que de nombreux objets (tels que pommes de pin, ananas, cœurs d'artichaut ou fleurs de tournesol) présentent des spirales tournant dans les deux sens ; leur comptage conduit à deux nombres successifs de la série de Fibonacci (1, 2, 3, 5, 8, 13, 21, 34, ...). Cette organisation n'a été expliquée qu'en 1992, par résolution d'un modèle décrivant la croissance des éléments de ces objets. Si de telles déductions se font tellement attendre, c'est qu'elles nécessitent des mathématiques élaborées, différentes d'un problème à l'autre, et beaucoup d'imagination.

L'*ordinateur* permet des simulations, quoique le nombre de particules en jeu dépasse souvent ses capacités. Par ailleurs, surtout si l'on dispose de trop peu de résultats expérimentaux, reproduire par calcul numérique un phénomène macroscopique peut être utile pour des applications techniques où des résultats quantitatifs sont indispensables. En ce qui concerne l'analyse d'une émergence, des expériences sur ordinateur, où l'on explore divers systèmes imaginaires analogues au système réel considéré mais moins complexes, sont précieuses car elles sont susceptibles de suggérer des idées originales. Cependant, les résultats de calculs sur ordinateur en eux-mêmes n'aident pas directement à la compréhension, car un excès d'information numérique sans théorie explicative est inintelligible.

De fait, comprendre signifie souvent éliminer tout ce qui n'est pas essentiel. C'est pourquoi la physique statistique est grande consommatrice de modèles physiques. En physique, la *modélisation* consiste à schématiser le système étudié en ne conservant à l'échelle de ses éléments que certaines propriétés pertinentes pour le phénomène collectif considéré. Ce choix nécessite beaucoup de flair ; c'est un art, parfois dangereux car on risque de diverger du système réel en se posant un problème suffisamment simplifié pour être soluble. Le modèle d'Ising, résolu par Onsager pour expliquer le comportement des ferromagnétiques non métalliques, laisse de côté tous les degrés de liberté autres que les spins, moments magnétiques élémentaires : les particules portant ces spins sont traitées comme des points matériels fixés sur un réseau. De plus, on imagine que le matériau n'a que deux dimensions et on réduit l'interaction à des spins voisins afin de permettre la résolution. En raison du caractère outrancier de ces simplifications, on ne pouvait espérer aucun accord quantitatif avec une transition paramagnétique–ferromagnétique réelle. Mais le modèle préserve les propriétés microscopiques essentielles pour rendre compte de cette transition, de sorte que sa solution a permis d'apporter un progrès majeur à sa compréhension.

Le succès de la modélisation physique repose sur l'*universalité* du phénomène étudié. Si les modalités de ce phénomène se trouvent être les mêmes pour des objets divers, il est licite de procéder par analogie, et l'on aboutit à des résultats qualitativement corrects si le matériau réel considéré appartient bien à la même classe que son modèle théorique simplifié. La résolution de modèles différents peut aussi aider à cerner la réalité. Cette méthode de mise en œuvre de l'émergence est courante, mais l'on n'a aucune garantie qu'elle soit opérationnelle car l'universalité n'est pas évidente a priori. Il existe cependant des circonstances favorables. Dans les années 1970, on a résolu le problème, ouvert depuis longtemps, des « exposants critiques ». Près d'un point critique comme celui de l'eau où la distinction entre liquide et vapeur disparaît, la chaleur spécifique par exemple se comporte comme une puissance de la

température avec un exposant dont il s'agit de déterminer théoriquement la valeur. On a pu prouver que de tels exposants, et plus généralement le comportement autour du point critique, étaient universels, à savoir qu'ils ne dépendent que d'un petit nombre de paramètres ; ceci a permis de les calculer et de les comparer favorablement à l'expérience. La démonstration repose sur la méthode dite du groupe de renormalisation ; elle permet d'identifier les paramètres pertinents comme étant les seuls qui subsistent lorsqu'on se rapproche progressivement du point critique par une sorte d'homothétie. Tous les autres paramètres s'éliminent ainsi, de sorte que l'émergence des exposants critiques gomme les différences entre systèmes physiques appartenant à une même classe d'universalité, caractérisée par les paramètres pertinents.

Une autre forme de modélisation physique, mieux contrôlée, consiste à procéder *par étapes*. Dans un gaz chimiquement inerte, émergent d'abord, à partir des noyaux et électrons, les molécules ; celles-ci peuvent ensuite être traitées comme des constituants élémentaires, dont les interactions sont prises en compte à travers leur section efficace. De même, il est nécessaire d'introduire plusieurs niveaux de description intermédiaires pour comprendre l'émergence des propriétés d'un métal : ses propriétés électromagnétiques s'expliquent en le modélisant comme un réseau d'ions et un gaz constitué par les électrons de conduction ; pour les propriétés mécaniques, élasticité ou plasticité, on part d'une échelle plus grande, où les objets élémentaires sont des défauts de cristallisation (lacunes, dislocations, joints de grain). D'ailleurs, en représentant la matière à l'échelle « microscopique » comme une assemblée d'électrons et de noyaux, nous ne sommes pas allés aussi loin qu'il était pensable : nous avons traité les noyaux comme des points matériels en oubliant qu'ils émergeaient eux-mêmes d'une structure plus élémentaire, en protons et neutrons, ou même en quarks. C'était parfaitement justifié puisque leur taille (de l'ordre de 10^{-15} m) est négligeable à l'échelle atomique. Il serait absurde dans ces conditions de chercher à faire émerger directement des propriétés à notre échelle à partir de l'échelle plus « fondamentale » des quarks. La situation est la même en biologie, où il est nécessaire d'en passer par un emboîtement de niveaux successifs : acides aminés, protéines, génome, organites, cellules, organes et organisme entier. Philosophiquement, il est licite de penser que tout pourrait se réduire aux lois les plus microscopiques ; scientifiquement, on peut tout au plus espérer appréhender la *hiérarchie des émergences* pas à pas.

On identifie ainsi dans le champ de la physique statistique une énorme quantité d'émergences, aussi bien pour l'analyse d'un phénomène donné à plusieurs échelles successives que pour des phénomènes différents sur une étape unique. Mais ce mot d'« émergence » recouvre une telle variété de démarches disparates qu'il ne peut être vu par le physicien que comme un fourre-tout. Un changement d'échelle peut aussi bien créer de l'ordre (cristal comme assemblée

de particules isotropes) que du désordre (turbulence issue d'équations hydrodynamiques régulières) – du continu (fluide constitué de molécules) que du discontinu (transition de phase). De plus, la mise en œuvre de chacune des émergences énumérées ci-dessus fait appel à des idées différentes et à des méthodes spécifiques, de sorte que l'émergence ne peut constituer un concept unique et général. D'ailleurs, une méthode valable dans un cas peut être fallacieuse dans un autre : il était tentant de transposer la théorie des catastrophes au problème des exposants critiques ; cela a été fait, mais le résultat était incorrect.

En définitive, l'idée d'émergence, pourtant omniprésente en physique statistique, doit être relativisée. L'adhésion au réductionnisme n'implique pas l'adoption de l'émergence en tant que méthode de recherche. Chaque niveau de description possède ses propres concepts et lois, et relier une paire de niveaux successifs nécessite la maîtrise des deux. Appréhender une émergence, c'est presque toujours dévoiler les fondations enfouies d'un édifice déjà existant ; ce n'est pas inventer un objet complexe à partir de ses constituants. La démarche de Jean Perrin, « découvrir l'invisible simple sous le visible compliqué », est extrêmement fructueuse, la démarche inverse illusoire. Comme l'écrit Anderson, « la relation entre le système et ses parties est intellectuellement une voie à sens unique. On s'attend à ce que la synthèse soit presque impossible ; en sens inverse, l'analyse peut se révéler non seulement possible mais porter toutes sortes de fruits. »