

# Du principe d'entropie maximale à partir du principe du travail virtuel

## About the maximum entropy principle from the virtual work principle

Qiuping A. Wang<sup>1</sup>, Qiong Ye<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Laboratoire SCIQ, ESIEA, 9 Rue Vésale, 75005 Paris, France

<sup>2</sup>Institut des Sciences de la Terre de Paris, CY Cergy Paris Université, 95000 Neuville sur Oise, France

**RÉSUMÉ.** Le principe d'entropie maximale (maxent) a été proposé comme méthode mathématique inférentielle fondée sur la subjectivité des distributions de probabilité et de l'information associée, ou entropie. Dans ce travail, nous soutenons que, si nous appliquons le principe fondamental du travail virtuel de la mécanique à la dynamique aléatoire des systèmes thermodynamiques, l'annulation du travail virtuel sur l'ensemble du système conduit naturellement à un état d'équilibre maximisant l'entropie thermodynamique. Cette approche est cohérente avec un statut objectif de l'entropie (caractère objectif de la théorie thermodynamique), et préconise de considérer maxent comme une loi physique régissant les comportements de systèmes complexes mêlant information et énergie.

**ABSTRACT.** The principle of maximum entropy (maxent) has been proposed as mathematical inferential method based on the subjectivity of probability distributions and of the associated information or entropy. In this work, we argue that, if we apply the fundamental principle of virtual work of mechanics to the random dynamics of thermodynamic systems, the vanishing virtual work on the whole system naturally yields equilibrium state maximizing thermodynamic entropy. This approach resonates with the objective view of entropy and the non-anthropocentric character of thermodynamics theory, and advocates considering maxent as a physical law governing the behaviors of entropy.

**MOTS-CLÉS.** Travaux virtuels, Maximisation, Entropie.

**KEYWORDS.** Virtual work, Entropy, Maximization.

### Introduction

Le principe d'entropie maximale (maxent) est largement utilisé en sciences statistiques et en ingénierie comme puissant outil permettant d'obtenir des distributions de probabilité. Maxent a été proposé par Jaynes [JAN65], [JAN63], [LAN841], comme un principe de science statistique et une méthode inférentielle inspirée des travaux de Boltzmann, Gibbs et Shannon qui, utilisant la formule de Shannon (entropie BS, voir ci-dessous) [BOL72][SHA48][GIB02]. Jaynes a pu utiliser cette méthode pour déduire les distributions de probabilité des systèmes thermodynamiques d'une manière simple et directe. On a pu reconnaître de nombreuses autres applications de maxent en mécanique statistique ; par exemple les travaux récents utilisent maxent pour justifier le chaos moléculaire ou Stosszahlansatz, un élément crucial de la preuve du *théorème H* et de l'interprétation du deuxième principe de la thermodynamique issu des travaux révolutionnaire de Boltzmann [CHL15][CHL17] ; de même pour l'étude des distributions de probabilité de la thermodynamique hors équilibre [CRO07]. Néanmoins, malgré son efficacité et son succès en physique, maxent a toujours été au centre des débats scientifiques et philosophiques et a soulevé de nombreuses questions et controverses [LAN841][UFF95] [MAR06]. Une question majeure est celle de savoir pourquoi un système thermodynamique choisit les microétats relatifs à l'équilibre en sorte que l'entropie BS atteint alors toujours sa valeur maximale.

L'hypothèse, maxent n'a pas de justification directe ou indirecte provenant d'observations ou de faits indéniables. Elle a été postulée comme principe premier, et justifiée soit à priori par la seconde loi thermodynamique sous réserve que l'entropie s'exprime selon la formule BS, soit à posteriori par le fait que les distributions de probabilité déduites soient vraies [LAN841]. Selon la théorie d'inférence statistique, l'Hypothèse est souvent justifiée par des arguments intuitifs basés sur la subjectivité des

probabilités [LAN841] ou par ses liens avec d'autres principes tels celui de consistance ou celui de raison, de Laplace, clairement insuffisante. Ce dernier fait en effet lui-même l'objet de sérieuses critiques [UFF95]. En tout état de cause, ce type d'arguments est insuffisant à la justification de l'application de maxent à l'entropie thermodynamique, qui est une quantité physique objective, et de même à la déduction des distributions de probabilité des systèmes thermodynamiques par ailleurs expérimentalement connus pour résulter de propriétés physiques objectives non contingentes, donc indépendantes de notre connaissance ou de notre ignorance.

Le présent travail propose de relier maxent à un principe fondamental bien connu de la mécanique classique, le principe du travail virtuel (PTV) [LAG65][ALE90], pour montrer que maxent est à part entière une loi fondamentale de la physique, découlant directement d'un principe simple à entendre. Comme on le sait, le PTV est un des principes parmi les plus fondamentaux de la mécanique classique : toutes les lois de la statique et de la dynamique des systèmes mécaniques, y compris le principe fondamental de moindre action, peuvent être dérivées du PTV. Nous pensons que ce travail illustrera de façon explicite et claire un lien important entre deux concepts physiques et contribuant ainsi une meilleure compréhension de maxent en tant que loi de la physique applicable en toute confiance.

## Le principe de travail virtuel (PTV)

Le principe du travail virtuel stipule que le travail total fourni par toutes les forces agissant sur un système en équilibre statique est nul pour tous les déplacements virtuels possibles compatibles avec les contraintes du système. Supposons le cas simple d'un système de  $N$  points de masse en équilibre sous l'action de la force  $\vec{F}_i$  ( $i=1,2,\dots,N$ ) sur le point  $i$  à la position  $\vec{r}_i$ , et imaginons le déplacement virtuel  $\delta\vec{r}_i$  du point  $i$ , alors le travail virtuel du point en question s'écrit  $\delta W_i = \vec{F}_i \cdot \delta\vec{r}_i$ . PTV stipule que le travail virtuel total  $\delta W$  pour toutes les forces  $\vec{F}_i$  et tous les déplacements  $\delta\vec{r}_i$  s'évanouie pour tout équilibre statique de tous les points, i.e.

$$\delta W = \sum_{i=1}^N \vec{F}_i \cdot \delta\vec{r}_i = 0 \quad (1)$$

Ce principe de statique a été étendu à l'équilibre dynamique des points mobiles par d'Alembert [LAE90] en ajoutant la force d'inertie  $-m_i\vec{a}_i$  appliquée à chaque point  $i$ :

$$\delta W = \sum_{i=1}^N (\vec{F}_i - m_i\vec{a}_i) \cdot \delta\vec{r}_i = 0 \quad (2)$$

où  $m_i$  est la masse du point  $i$  et  $\vec{a}_i = \ddot{\vec{r}}_i$  son accélération. Nous pouvons déduire de ce principe l'équation newtonienne du mouvement et d'autres règles fondamentales de la dynamique tels que le principe de moindre action.

Nous avons par ailleurs  $m\ddot{\vec{r}}_i \cdot \delta\vec{r}_i = m\delta\dot{\vec{r}}_i \cdot \dot{\vec{r}}_i = \delta(\frac{1}{2}m\dot{\vec{r}}_i^2) = \delta e_{ki}$  qui correspond à la variation virtuelle de l'énergie cinétique  $e_{ki}$  du point  $i$ . Supposons maintenant qu'il n'y ait pas de force dissipative dans le système, ce qui signifie que son énergie ne varie pas s'il est fermé et isolé. Dans ce cas, l'interaction entre une paire de particules (ou entre une particule et son environnement) devrait être conservative. Cela suppose l'existence d'une énergie potentielle  $e_{pi}$  associée à tout point  $i$  soumis à la force  $\vec{F}_i$  au moment du déplacement virtuel, avec  $\vec{F}_i = -\nabla e_{pi}$  et

$$\sum_{i=1}^N \vec{F}_i \cdot \delta\vec{r}_i = \sum_{i=1}^N -\nabla_i e_i \cdot \delta\vec{r}_i = -\sum_{i=1}^N \delta e_{pi} \quad (3)$$

où  $\delta e_{pi}$  est la variation virtuelle du potentiel au point  $i$  due au déplacement virtuel  $\delta\vec{r}_i$ . Il s'en suit

$$\delta W = -\sum_{i=1}^N (\delta e_{pi} + \delta e_{ki}) = -\sum_{i=1}^N \delta e_i = -\delta E \quad (4)$$

où  $\delta e_i$  est la variation virtuelle de l'énergie totale  $e_i = e_{pi} + e_{ki}$  du point  $i$  alors que  $E = \sum_{i=1}^N e_i$  devient l'énergie totale de tout le système

## Principe du travail virtuel pour les mouvements aléatoires

À ce stade, nous n'avons appliqué aucune règle relevant de la statistique ; chaque point du système est supposé famille de mouvement réguliers, affecté d'aucune force aléatoire. Considérons maintenant un système thermodynamique réels dans lequel tous les points (ou particules) se déplacent aléatoirement. Les mouvements doivent alors être décrits en utilisant des lois de probabilités. Sans évoquer le débat sur l'objectivité/subjectivité du caractère aléatoire et celui portant sur le sens de l'incertitude probabiliste, admettons simplement qu'une particule en mouvement aléatoire peut évoluer d'un état donné vers différents états probables, en sorte qu'à tout instant, ce soit une distribution de probabilité de la particule sur les différents états possibles qui doit être utilisée selon les règles de la physique statistique. Introduisons ici formalisme probabiliste afférent pour le PTV.

Nous examinons un ensemble de  $N$  particules d'un système thermodynamique reposant sur différents microétats  $j$ , chacun ayant la probabilité  $p_j$  ( $j=1,2 \dots w$ ). Les déplacements virtuels considérés ci-dessus se produisent maintenant à différents micro-états. Dans ce cas, le travail virtuel donné par l'équation (4) doit être écrit pour chaque micro-état.  $j$ , i.e.,  $\delta W_j = \sum_{i=1}^N (\delta e_i)_j = \delta E_j$  où  $(\delta e_i)_j$  est l'énergie de la particule  $i$  quand le système est dans un microétats  $j$  équipé d'une énergie totale  $\delta E_j$ . Evidemment,  $\delta W_j$  ne peut plus répondre à PTV qui donnerait  $\delta W_j = 0$  car il ne s'agit plus maintenant que d'une des nombreuses possibilités virtuelles probables affectée d'une probabilité  $p_j$ , situation qui peut ou non se produire à un instant donné. Dans une telle situation, le PTV doit être appliqué à l'ensemble du système thermodynamique à tout instant ; le seul travail virtuel utile est donc la moyenne d'ensemble de  $\delta W_i$  sur tous les microétats possibles, i.e.,

$$\delta W = \sum_j P_j \delta W_j = \sum_j P_j \delta E_j = \overline{\delta E} \quad (5)$$

où  $\overline{\delta E} = \sum_j P_j \delta E_j$  est la Moyenne de la variation virtuelle  $\delta E_j$  de l'énergie  $E_j$  quand le système est dans le microétat  $j$ .

Maintenant considérons l'énergie interne de tout le système thermodynamique donné par l'ensemble moyenné  $\bar{E} = \sum_j P_j E_j$ . Sa variation virtuelle due aux déplacements virtuels sur les particules est donnée par  $\delta \bar{E} = \delta \sum_j P_j E_j = \sum_j P_j \delta E_j + \sum_j E_j \delta P_j = \overline{\delta E} + \delta Q = \delta W + \delta Q$  où  $\delta Q = \sum_j E_j \delta P_j$  est le transfert virtuel de chaleur vers le système. Lorsque le système est en équilibre thermodynamique à température absolue  $T$ ,  $\delta Q = T \delta S$  avec  $\delta S$  la variation virtuelle de l'entropie thermodynamique  $S$  due au transfert de chaleur  $\delta Q$  [YER71]. Finalement nous obtenons  $\delta W = \delta \bar{E} - T \delta S$ . PTV est maintenant appliqué au travail virtuel avec  $\delta W = 0$ , conduisant à l'expression  $\delta \bar{E} - T \delta S = 0$  ou encore

$$\delta(S - \beta \bar{E}) = 0 \quad (6)$$

qui est la forme habituelle de maxent utilisant le multiplicateur de Lagrange  $\beta = \frac{1}{T}$  associé à la contrainte d'énergie interne  $\bar{E}$ . La maximalité de ce résultat n'est pas évidente car  $\delta W = 0$  est en général, un extremum (maximum, minimum ou stationnaire). Le caractère maximal de l'équation (6) peut être justifié par la concavité de l'entropie  $S$  en fonction de la probabilité. L'entropie étant une mesure du caractère aléatoire de la dynamique, elle devrait dépendre de la distribution de probabilité.  $P_j$  du système, et la partie de l'entropie dépendant de  $P_j$  est en fait positif pour toute valeur de  $P_j$  entre 0 et 1 doit être nul pour  $P_j = 0$  ou  $P_j = 1$ . Donc dans l'intervalle  $0 \leq P_j \leq 1$ ,  $S$  est concave. Cette propriété a en fait été

utilisée comme axiome dans la dérivation de la formule d'entropie BS pour les distributions de probabilité discrètes [SHA48][KHI57].

L'équation (6) est le calcul de maxent pour l'ensemble canonique. Son extension à l'ensemble grand-canonique peut être obtenue directement lorsque le nombre de particules  $N$  devient une variable pour les systèmes ouverts. Ceci est illustré en annexe ; le résultat est le suivant :

$$\delta(S - \beta \bar{E} + \beta \mu \bar{N}) = 0 \quad (7)$$

Les équations (6) et (7) ont été utilisées dans l'ouvrage [PLA07] pour remplacer maxent dans la dérivation des distributions de probabilité. Le présent travail corrobore les travaux de [PLA07] en montrant que l'équation (6) est simplement maxent, issue d'un principe fondamental de la physique.

## Conclusion

En résumé, le calcul variationnel relatif à 'maxent' s'avère être une conséquence naturelle du principe du travail virtuel appliqué aux systèmes thermodynamiques. Auparavant considéré comme une méthode inférentielle basée sur la subjectivité de l'information, de l'entropie et des probabilités, l'approche proposée, partant d'un principe fondamental de la physique permet de considérer maxent comme une loi de la physique dans le même sens que toutes les lois de la physique que l'on a pu déduire de ce principe fondamental. Dès lors le physicien est plus à l'aise pour appliquer le principe maxent à l'étude des distributions de probabilité en utilisant des quantités physiques objectives telles que l'entropie, l'énergie, le nombre de particules, la pression, la température, etc. En effet, le calcul relatif à maxent et les contraintes associées (énergie moyenne par exemple) découlent naturellement de la disparition d'un travail virtuel, résultat beaucoup plus naturel que d'introduire les contraintes avec des arguments certes plausibles, mais toujours ambigus, tels que par exemple l'argument qui avance que la valeur moyenne d'une observable représente une information factuelle à prendre en compte dans la maximisation de l'information lors de l'obtention de la distribution de probabilité optimale [UFF95]. Au-delà, considérer maxent comme une loi physique n'empêche en rien d'utiliser ce principe comme méthode d'inférence, surtout lorsque l'entropie utilisée n'est pas thermodynamique. Passer d'une loi physique à l'inférence est plus sûr et fiable que l'inverse.

Il convient de souligner que la validation de maxent n'est contrainte par aucune forme fonctionnelle d'entropie. Ce degré de liberté ouvre la voie à l'application du principe à toutes les formulations possibles de l'entropie donc à toutes les distributions de probabilité correspondantes, et vice versa ; voir [WAN08][KAA25] et les références qui y figurent pour plus de détails.

Enfin, il existe une composante philosophique à l'approche proposée. Comme chacun sait, un débat centenaire en thermodynamique porte sur la nature anthropocentrée (subjectivité/objectivité) de la théorie thermodynamique et de son pivot : la notion d'entropie [ROB23]. Le travail effectué appuie l'option objective et fournit un argument solide en faveur de la nature objective de l'entropie, puisque son fondement est adossé à un principe fondamental de la physique, et non relative à une inférence logique qui même faiblement biaisée reste basée sur la subjectivité de la notion de probabilités. Il convient de noter que cette conclusion remet en question l'équivalence largement acceptée entre entropie et information, puisque l'information est en général une quantité subjective, relevant de notre perception et de notre intelligibilité des faits. Cette équivalence (spéculative) a été inspirée par les fondateurs de la théorie de l'information [JAN65] [JAN63] [LAN84] [SHA48] [KHI57] qui ont utilisé certaines propriétés de l'entropie thermodynamique comme axiomes pour dériver la formule BS. Au passage, nous aimerions mentionner la possibilité de dériver la formule BS sans tenir compte de l'entropie thermodynamique [KAA25]. Il est également possible d'étendre l'approche proposée aux systèmes hors équilibre et de passer des principes fondamentaux (VWP et principe de moindre action) au deuxième principe de la thermodynamique [WAN14]. Ce travail est en cours.

## Bibliographie

- [JAN65] E.T. Jaynes, *Gibbs vs Boltzmann Entropies*. American Journal of Physics. **33** (1965) 391
- [JAN63] E.T. Jaynes, *Information theory and statistical mechanics*, Brandeis University Summer Institute Lectures in Theoretical Physics. **3** (1963)181
- [LAN841] E.T. Jaynes, *The evolution of Carnot's principle*, The opening talk at the EMBO Workshop on Maximum Entropy Methods in x-ray crystallographic and biological macromolecule structure determination, Orsay, France, April 24-28, 1984; Where do we go from here? in *Maximum entropy and Bayesian methods in inverse problems*, pp.21-58, edited by C. Ray Smith and W.T. Grandy Jr., D. Reidel, Publishing Company (1985)
- [BOL72] L. Boltzmann, *Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen*. Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften **66** (1872) 275. English translation: L. Boltzmann, Further Studies on the Thermal Equilibrium of Gas Molecules. The Kinetic Theory of Gases. History of Modern Physical Sciences. 1. pp. 262–349.
- [SHA48] C.E. Shannon, *A Mathematical Theory of Communication*. Bell System Technical Journal, **27** (1948) 379.
- [GIB02] J.W. Gibbs, *Elementary Principles in Statistical Mechanics*. New York: Charles Scribner's Sons (1902)
- [CHL15] Gregor Chliamovitch, Orestis Malaspinas and Bastien Chopard, *A Truncation Scheme for the BBGKY2 Equation*, Entropy **17** (2015) 7522
- [CHL17] Gregor Chliamovitch, Orestis Malaspinas and Bastien Chopard, *Kinetic Theory beyond the Stosszahlansatz*, Entropy **19** (2017) 381
- [CRO07] G.E. Crooks, *Beyond Boltzmann-Gibbs statistics: Maximum entropy hyperensembles out of equilibrium*, Phys. Rev. E **75** (2007) 041119
- [UFF95] Joos Uffink, *Can the maximum entropy principle be explained as a consistency requirement*, Studies in History and Philosophy of Modern Physics, **26B** (1995) 223
- [MAR06] L.M. Martyushev and V.D. Seleznev, *Maximum entropy production principle in physics, chemistry and biology*, Physics Reports, **426** (2006) 1
- [LAG65] J.L. Lagrange, *Mécanique analytique*, Blanchard, reprint , Paris (1965) (Also: Oeuvres, Vol. 11.)
- [ALE90] J. D'Alembert, *Traité de dynamique*, Editions Jacques Cabay , Sceaux (1990)
- [YER71] Y.P. Terletskii, *Statistical physics*, North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1971
- [KHI57] A. I. Khinchin, *Mathematical Foundations of Information Theory*, Dover, New York, 1957
- [PLA07] A. Plastino and E.F.M. Curado, *Equivalences with entropie maximum principle* Phys. Rev. E, **72**(2005)047103; E.F.M. Curado and A. Plastino, *Physica A* **386** (2007) 155
- [WAN08] Q.A. Wang, *Probability distributions and entropy as a measure of uncertainty*, J. Phys. A: Math. Theor. **41** (2008) 065004
- [WAN24] R. Wang, F.X. Machu, J. Cocks, A. El Kaabouchi and Q.A. Wang, *A non-negative measure of informational entropy for continuous probability distributions*, submitted (2024), hal-03841203
- [ROB23] Katie Robertson and Carina Prunkl, *Is Thermodynamics Subjective?* Philosophy of Science, **90** (2023) 1320
- [KAA25] A. El Kaabouchi and Q.A. Wang, *Axioms and uniqueness theorem of information entropies*, Lila Entropy Project V3 ISTE Ed. Nancy 2025
- [WAN14] Q.A. Wang, A. El Kaabouchi, *From random motion of Hamiltonian systems to Boltzmann H theorem and second law of thermodynamics -- a pathway by path probability*, Entropy, **16** (2014) 885

## Annexe

Un microétat  $j$  d'un système composé de  $N$  particules est une certaine distribution des  $N$  particules sur les états d'énergie  $k$  d'une particule  $\varepsilon_k$  avec  $k=1, 2, 3 \dots g$  (le nombre d'états d'une particule  $g$  peut être très grand). On imagine  $N_j$  particules identiques distribuées sur les états  $g$  à un microétat  $j$  qui est ici une combinaison de nombres  $g$   $n_k$  nombre de particules sur  $g$  états, i.e.,  $j=\{n_1, n_2, \dots n_g\}$ . Nous avons

$N_j = \sum_{k=1}^g (n_k)_j$  et  $E_j = \sum_{k=1}^g (n_k)_j \varepsilon_k$ . Pendant le travail virtuel, seule l'énergie des états d'une particule varie.

Pour un microétat  $j$ , le travail virtuel donné par l'équation (4) est désormais

$$\delta W_j = - \sum_k (n_k)_j \delta \varepsilon_k = - \delta \sum_k (n_k)_j \varepsilon_k + \sum_k (\delta n_k)_j \varepsilon_k = -\delta E_j + \sum_k (\delta n_k)_j \varepsilon_k. \quad (8)$$

Le premier terme du membre de droite et la variation de l'énergie totale résultant de la variation  $\delta \varepsilon_k$  causé par le travail virtuel et par le changement du nombre de particules  $\delta N_j$  du système. Le second terme concerne uniquement la variation du nombre de particules ; soit encore  $\delta N_j = \sum_k (\delta n_k)_j$ . Donc l'Eq.(5) peut se lire

$$\delta W = - \sum_j p_j \delta E_j + \sum_j p_j \sum_k \varepsilon_k (\delta n_k)_j = -\overline{\delta E} + \sum_k \varepsilon_k \overline{\delta n_k} = -\overline{\delta E} + \mu \overline{\delta N}. \quad (9)$$

Où nous utilisons la notion de potentiel chimique  $\mu = \sum_k \varepsilon_k \overline{\delta n_k} / \overline{\delta N}$  with  $\overline{\delta N} = \sum_j p_j \delta N_j =$

$\sum_j p_j \sum_k (\delta n_k)_j = \sum_k \overline{\delta n_k}$  and  $\overline{\delta E} = \sum_j p_j \delta E_j$ . Puisque  $\overline{\delta E} = \delta \overline{E} - \sum_j E_j \delta p_j$  et  $\overline{\delta N} = \delta \overline{N} - \sum_j N_j \delta p_j$

avec  $\overline{E} = \sum_j p_j E_j$  et  $\overline{N} = \sum_j p_j N_j$ , nous obtenons

$$\delta W = -\delta \overline{E} + \sum_j E_j \delta p_j + \mu \delta \overline{N} - \mu \sum_j N_j \delta p_j = -\delta \overline{E} + \mu \delta \overline{N} + \sum_j (E_j - \mu N_j) \delta p_j \quad (10)$$

Soit en comparant avec la première loi de la thermodynamique  $\delta \overline{E} = \delta Q - \delta W + \mu \delta \overline{N}$  pour les ensembles grand-canoniques, nous pouvons identifier le transfert de chaleur sous la forme  $\delta Q = \sum_j (E_j - \mu N_j) \delta p_j$ . Pour un processus virtuel réversible on pourra écrire  $\delta S = \beta \delta Q = \beta \sum_j (E_j - \mu N_j) \delta p_j$  et ainsi obtenir

$$\delta W = -\delta \overline{E} + \mu \delta \overline{N} + \frac{\delta S}{\beta}. \quad (11)$$

où  $S$  est l'entropie thermodynamique de la seconde loi de la thermodynamique.

Soit selon VWP avec  $\delta W = 0$ ,

$$\delta(S - \beta \overline{E} + \beta \mu \overline{N}) = 0 \quad (12)$$

Qui est la base de calcul de maxent pour un ensemble grand canonique.