Le second principe, l'irreversibilié et les fluctuations

Bernard DERRIDA

Ecole Normale Supérieure, Paris

Paris le 17 Octobre 2012

PLAN

Irréversibilité

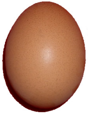
Le second principe et les fluctuations

Relation de Jarzinsky 1997

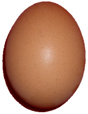
Systèmes hors d'équilibre

Théorème de fluctuation - Gallavotti Cohen 1995

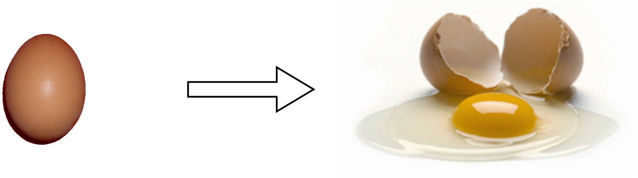
IRREVERSIBILITE DANS LA VIE QUOTIDIENNE



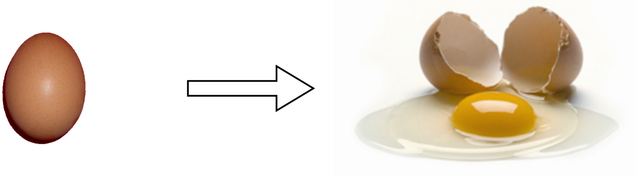
IRREVERSIBILITE DANS LA VIE QUOTIDIENNE



IRREVERSIBILITE DANS LA VIE QUOTIDIENNE



IRREVERSIBILITE DANS LA VIE QUOTIDIENNE

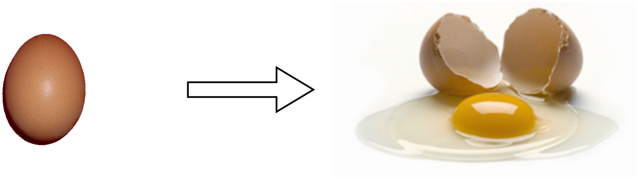


Poincaré: "Qu'une goutte de vin tombe dans un verre d'eau; quelle que soit la loi du mouvement interne du liquide, nous le verrons bientôt se colorer d'une teinte rosée uniforme et à partir de ce moment on aura beau agiter le vase, le vin et l'eau ne paraîtront plus pouvoir se séparer.

...

Tout cela, Maxwell et Boltzmann l'ont expliqué, ... "

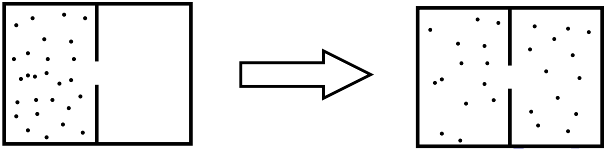
IRREVERSIBILITE DANS LA VIE QUOTIDIENNE



Poincaré: "Qu'une goutte de vin tombe dans un verre d'eau; quelle que soit la loi du mouvement interne du liquide, nous le verrons bientôt se colorer d'une teinte rosée uniforme et à partir de ce moment on aura beau agiter le vase, le vin et l'eau ne paraîtront plus pouvoir se séparer.

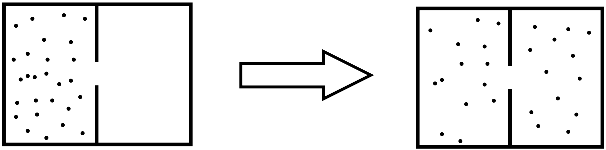
...

Tout cela, Maxwell et Boltzmann l'ont expliqué, ... "

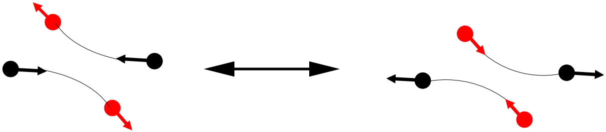


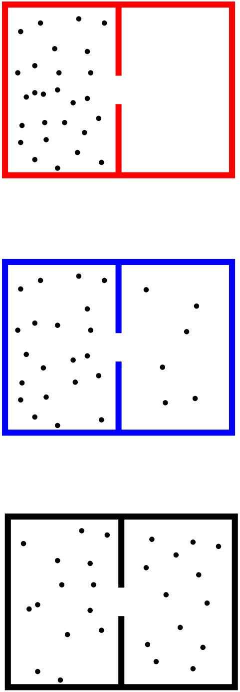
REVERSIBILITE ET IRREVERSIBILITE

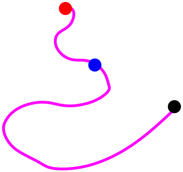
A notre échelle, les lois de la Physique sont irréversibles



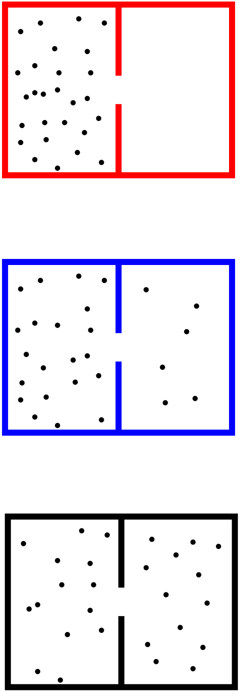
La Physique à l'échelle microscopique est réversible

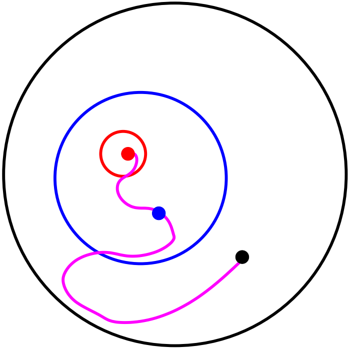






Dans l'espace des phases





Dans l'espace des phases

$$\boxed{\text{volume noir } = 2^N \times \text{volume rouge}}$$

ESPACE DES PHASES

Espace de très très haute dimension

$$D = 10^{1000000000000000000000000}$$

ESPACE DES PHASES

Espace de très très haute dimension

$$D = 10^{1000000000000000000000000}$$

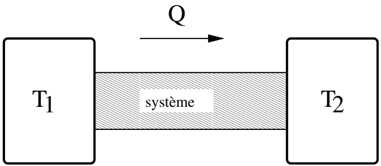
Exemple : une sphère de 1 mètre de rayon en dimension D:
Quelle fraction f du volume est à plus d'un millimètre de la surface?

- Si $D = 3$, $\quad f = 99.7\%$
- Si $D = 500$, $\quad f = 60\%$
- Si $D = 10^6$, $\quad f = 1/10^{500}$

Toutes les fonctions *raisonnables* sont presque partout constantes.

- Nombre d'atomes dans la partie gauche
- Nombre de collisions sur un des murs pendant un intervalle de temps
- ...

Clausius: "Il n'existe pas de transformation thermodynamique dont le seul effet est d'extraire de la chaleur d'une source chaleur froide pour la restituer à une source de chaleur chaude"



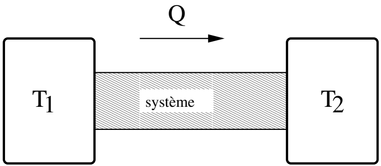
L'énergie coule du chaud vers le froid

$$\boxed{Q > 0 \quad \text{si} \quad T_1 > T_2}$$

LE SECOND PRINCIPE DE LA THERMODYNAMIQUE

Cycles de Carnot, définition thermodynamique de l'entropie, ...

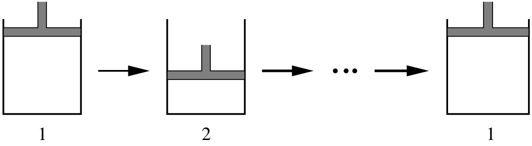
Clausius: "Il n'existe pas de transformation thermodynamique dont le seul effet est d'extraire de la chaleur d'une source chaleur froide pour la restituer à une source de chaleur chaude"



L'énergie coule du chaud vers le froid

$$\boxed{Q > 0 \quad \text{si} \quad T_1 > T_2}$$

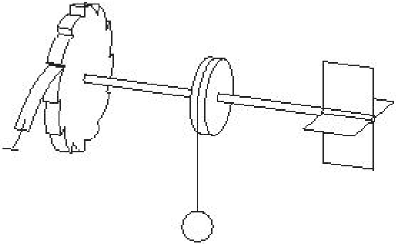
Kelvin: "Il n'existe pas de transformation thermodynamique dont le seul effet est d'extraire du travail d'une seule source de chaleur"



Le travail W fourni au système est positif

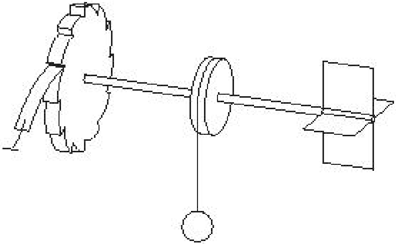
$$\boxed{W \geq 0}$$

LE SECOND PRINCIPE ET LES FLUCTUATIONS



Smoluchowski

LE SECOND PRINCIPE ET LES FLUCTUATIONS

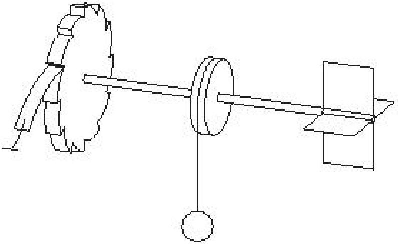


Smoluchowski

Maxwell: "The true logic of this world is probability"

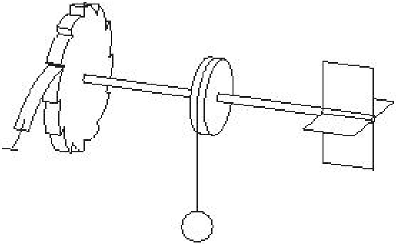
Boltzmann: "My minimum theorem as well as the so-called second law of thermodynamics are only theorems of probability"

Gibbs: "The law of thermodynamics may be easily obtained from the principle of statistical physics, of which they are the incomplete expression"



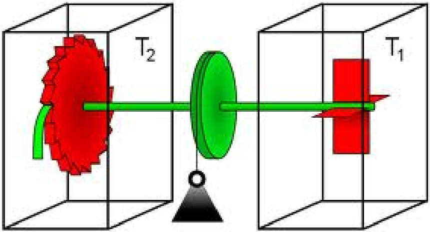
A l'équilibre

ça ne marche pas



A l'équilibre

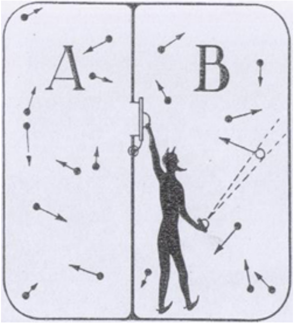
ça ne marche pas



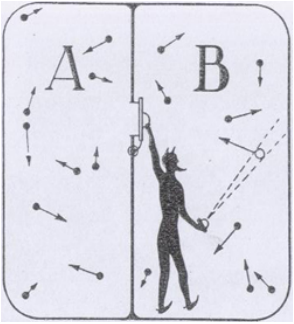
Si $T_2 < T_1$,

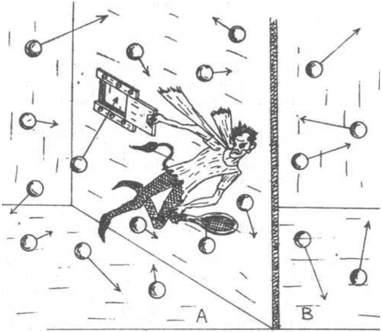
ça marche!

DEMON DE MAXWELL

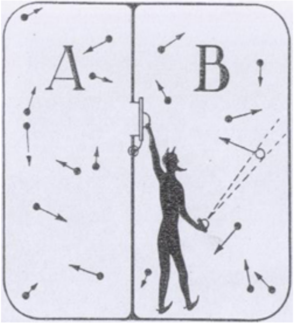


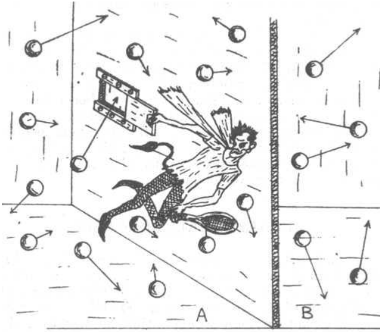
DEMON DE MAXWELL

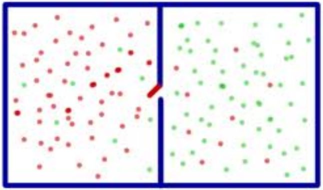




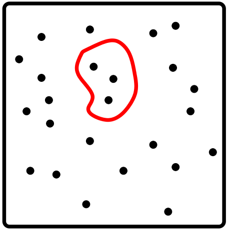
DEMON DE MAXWELL







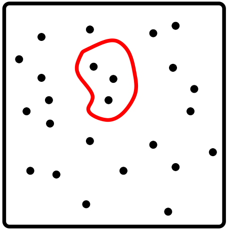
Fluctuations de densité



n particules dans un volume v

Temps pour voir une fluctuation de 1% de la densité $\frac{n}{v}$ dans une sphère de rayon a?

Fluctuations de densité



n particules dans un volume v

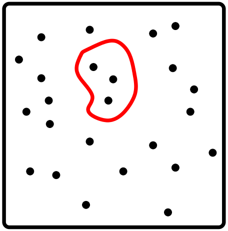
Temps pour voir une fluctuation de 1% de la densité $\frac{n}{v}$ dans une sphère de rayon a?

Chandrasekhar 1943:

Rayon a	Temps
10^{-5} cm	10^{-11} seconde
2.5×10^{-5} cm	1 seconde
$3. \times 10^{-5}$ cm	10^{6} secondes
5.10^{-5} cm	10^{68} secondes
1 cm	$10^{10^{14}}$ secondes

THEOREME DE FLUCTUATION DISSIPATION

A partir de $S = k \log \Omega$ Einstein



n particules dans le volume v

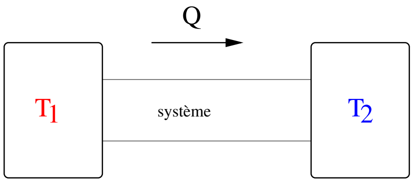
$$\boxed{\langle n^2 \rangle - \langle n \rangle^2 = kT \; v\rho \; \kappa}$$

où κ est la compressibilité,
ρ la densité dans le grand réservoir
et T la température.

$$\boxed{\text{Variance d'une fluctuation} = k \times \text{Coefficient de réponse}}$$

Constante de Boltzmann $k \sim 10^{-23} J/K$

COURANTS



Q= énergie transférée
pendant le temps t

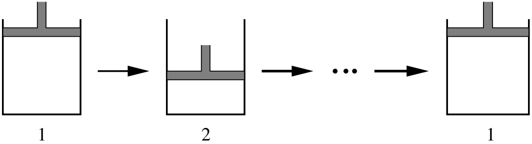
- Fluctuations de courant à l'équilibre $(T_1 = T_2 = T)$

$$\boxed{\langle Q^2 \rangle = k \times (2DT^2) \times t}$$

- Réponse à une petite différence de température

$$\boxed{\langle Q \rangle = D \times (T_1 - T_2) \times t}$$

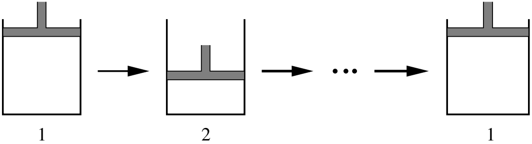
RELATION DE JARZINSKY 1997



Un protocole:

1. système à l'équilibre
2. $h(t)$ hauteur du piston pour $t_0 < t < t_1$ avec $h(t_0) = h(t_1)$

RELATION DE JARZINSKY 1997



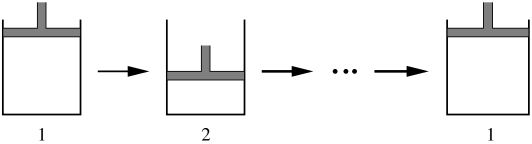
Un protocole:

1. système à l'équilibre
2. $h(t)$ hauteur du piston pour $t_0 < t < t_1$ avec $h(t_0) = h(t_1)$

Second principe:

$$\boxed{W \geq 0}$$

RELATION DE JARZINSKY 1997



Un protocole:

1. système à l'équilibre
2. $h(t)$ hauteur du piston pour $t_0 < t < t_1$ avec $h(t_0) = h(t_1)$

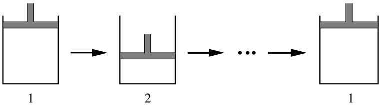
Second principe:

$$\boxed{W \geq 0}$$

"Expérience"

$$W_1, W_2, ... W_N \quad \Rightarrow \quad P(W)$$

RELATION DE JARZINSKY 1997



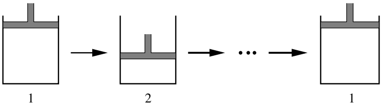
le travail W fourni au système est positif

$$\boxed{W \geq 0}$$

Si la condition initiale est à l'équilibre à la température T, pour une transformation quelconque qui ramène un système à son état initial,

$$\boxed{\left\langle e^{-\frac{W}{kT}} \right\rangle = 1}$$

RELATION DE JARZINSKY 1997



le travail W fourni au système est positif

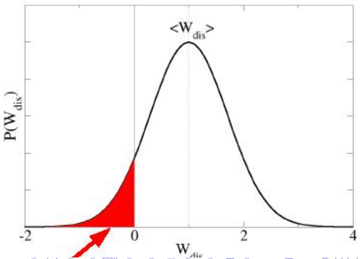
$$\boxed{W \geq 0}$$

Si la condition initiale est à l'équilibre à la température T, pour une transformation quelconque qui ramène un système à son état initial,

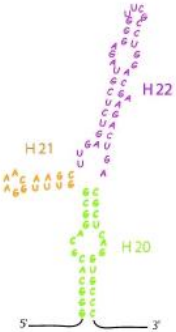
$$\boxed{\left\langle e^{-\frac{W}{kT}} \right\rangle = 1}$$

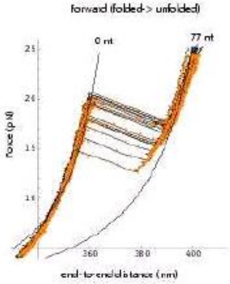
Conséquences:

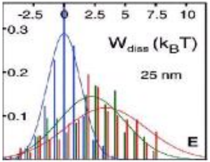
- $\langle W \rangle \geq 0$
- il y a sûrement des évènements avec $W < 0$
- leur probabilité est très faible
- vérification expérimentale: petits systèmes (ARN,..)



EXPERIENCES SUR l'ARN

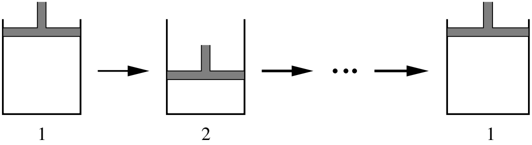






Butsamante, Ritort et al

RELATION DE JARZINSKY 1997



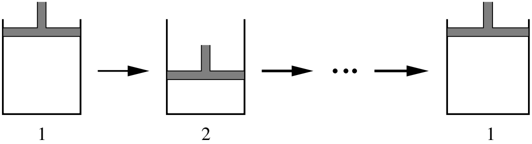
Un protocole:

1. système à l'équilibre
2. $h(t)$ hauteur du piston pour $t_0 < t < t_1$ avec $h(t_0) \neq h(t_1)$

Si la condition initiale est à l'équilibre à la température T, pour une transformation quelconque

$$\boxed{\left\langle e^{-\frac{W}{kT}} \right\rangle = \exp\left[-\frac{F_{\mathrm{final}} - F_{\mathrm{initial}}}{kT}\right]}$$

RELATION DE JARZINSKY 1997



Un protocole:

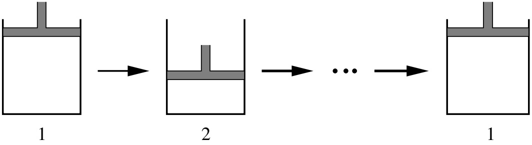
1. système à l'équilibre
2. $h(t)$ hauteur du piston pour $t_0 < t < t_1$ avec $h(t_0) \neq h(t_1)$

Si la condition initiale est à l'équilibre à la température T, pour une transformation quelconque

$$\boxed{\left\langle e^{-\frac{W}{kT}} \right\rangle = \exp\left[-\frac{F_{\text{final}} - F_{\text{initial}}}{kT} \right]}$$

$$\Rightarrow \qquad \langle W \rangle \geq F_{\text{final}} - F_{\text{initial}}$$

RELATION DE JARZINSKY 1997



Un protocole:

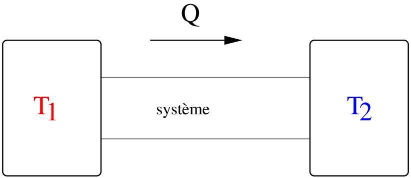
1. système à l'équilibre
2. $h(t)$ hauteur du piston pour $t_0 < t < t_1$ avec $h(t_0) \neq h(t_1)$

Si la condition initiale est à l'équilibre à la température T, pour une transformation quelconque

$$\boxed{\left\langle e^{-\frac{W}{kT}} \right\rangle = \exp\left[- \frac{F_{\text{final}} - F_{\text{initial}}}{kT} \right]}$$

$$\Rightarrow \quad \langle W \rangle \geq F_{\text{final}} - F_{\text{initial}} \qquad \text{second principe}$$

COURANTS



Q= énergie transférée pendant le temps t

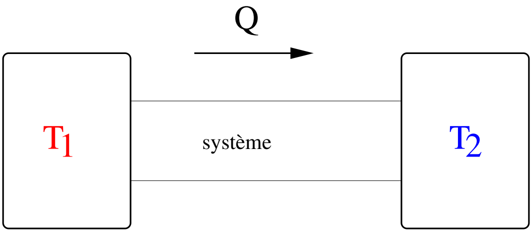
- Fluctuations de courant à l'équilibre ($T_1 = T_2 = T$)

$$\boxed{\langle Q^2 \rangle = k \times (2DT^2) \times t}$$

- Réponse à une petite différence de température

$$\boxed{\langle Q \rangle = D \times (T_1 - T_2) \times t}$$

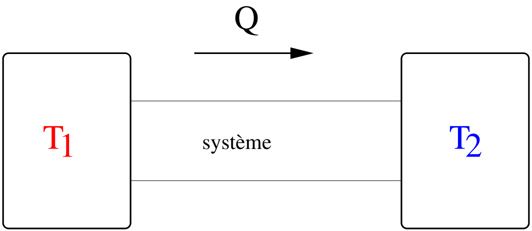
THEOREME DE FLUCTUATION 1994



Un protocole:

1. système dans l'état stationnaire avec $T_1 \geq T_2$
2. on mesure Q pendant le temps t

THEOREME DE FLUCTUATION 1994



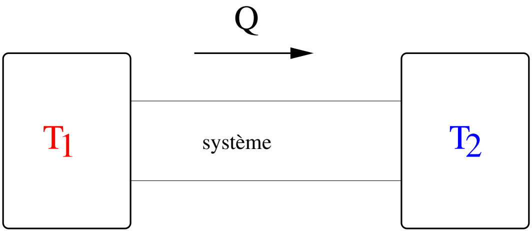
Un protocole:

1. système dans l'état stationnaire avec $T_1 \geq T_2$
2. on mesure Q pendant le temps t

Second principe:

$$\boxed{Q \geq 0}$$

THEOREME DE FLUCTUATION 1994



Un protocole:

1. système dans l'état stationnaire avec $T_1 \geq T_2$
2. on mesure Q pendant le temps t

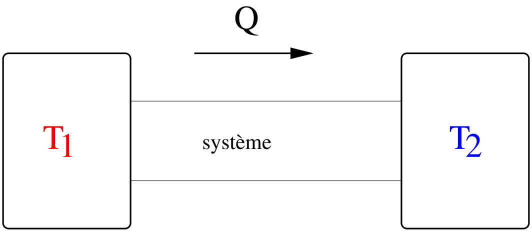
Second principe:

$$\boxed{Q \geq 0}$$

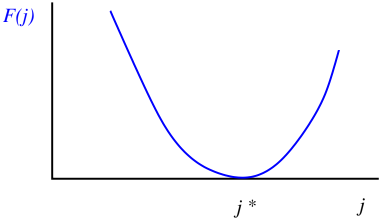
"Expérience"

$$Q_1, Q_2, \ldots Q_N \quad \Rightarrow \quad P(Q)$$

GRANDES DEVIATIONS

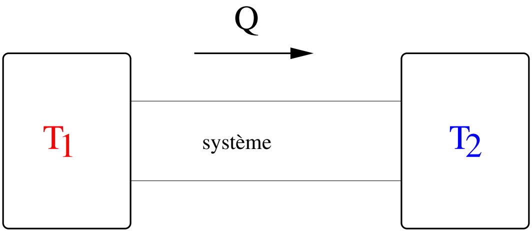


Q_t Energie transféré pendant le temps t

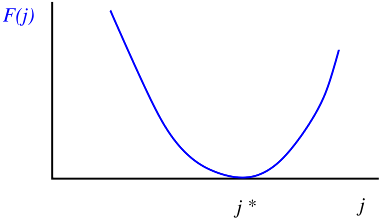


$$\boxed{\mathrm{Pro}\left(\frac{Q_t}{t} = j\right) \sim \exp[-t\ F(j)]}$$

GRANDES DEVIATIONS



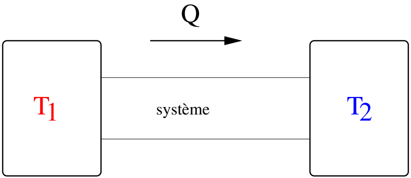
Q_t Energie transféré pendant le temps t



$$\boxed{\mathrm{Pro}\left(\frac{Q_t}{t}=j\right)\sim \exp[-t\ F(j)]}$$

Le développement de $F(j)$ autour de j^* donne des fluctuations gaussiennes

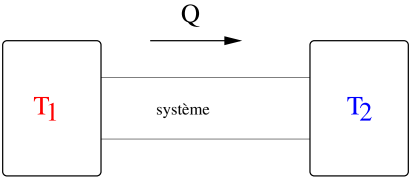
THEOREME DE FLUCTUATION (grandes déviations)



Evans Cohen Morris 1994
Gallavotti Cohen 1995
⋮
Lebowitz Spohn 1999

Aux temps longs: $$\boxed{\frac{\mathrm{Pro}(Q)}{\mathrm{Pro}(-Q)} \sim \exp\left[Q\left(\frac{1}{kT_2} - \frac{1}{kT_1}\right)\right]}$$

THEOREME DE FLUCTUATION (grandes déviations)



Evans Cohen Morris 1994
Gallavotti Cohen 1995
⋮
Lebowitz Spohn 1999

Aux temps longs: $$\boxed{\frac{\mathrm{Pro}(Q)}{\mathrm{Pro}(-Q)} \sim \exp\left[Q\left(\frac{1}{kT_2}-\frac{1}{kT_1}\right)\right]}$$

Conséquences:

- Caractère probabiliste du second principe
- Relation universelle
- Systèmes mésoscopiques, milieux granulaires

$$\lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\log\frac{\mathrm{Pro}(Q=jt)}{\mathrm{Pro}(Q=-jt)} = j\left(\frac{1}{kT_2}-\frac{1}{kT_1}\right)$$

LES ENSEMBLES STATISTIQUES

A l'équilibre:

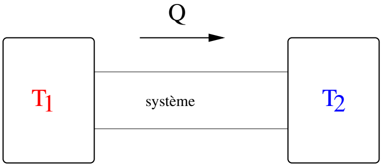
- Système isolé: toutes les configurations $\mathcal{C}$ d'énergie $E(\mathcal{C}) = E$ sont équiprobables
- Système à l'équilibre à la température T:

$$\boxed{\mathrm{Pro}(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z} \exp\left[-\frac{E(\mathcal{C})}{kT}\right]}$$

Boltzmann Gibbs

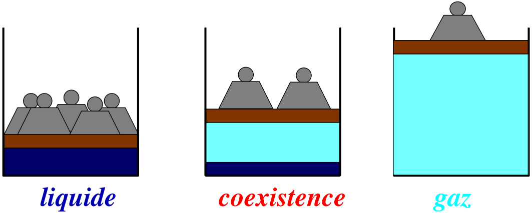
Hors d'équilibre:

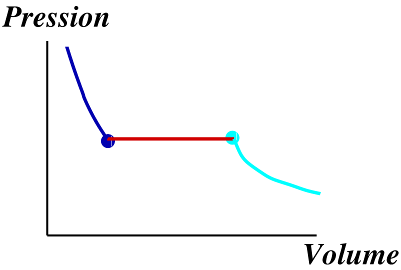
$$\boxed{\mathrm{Pro}(\mathcal{C}) = ?}$$

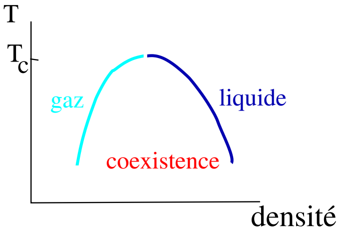


TRANSITIONS DE PHASE

Van der Waals
Maxwell
Curie Weiss
Landau



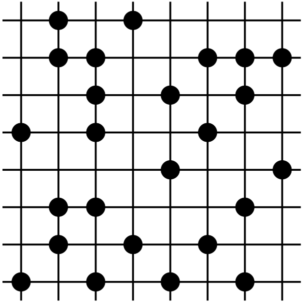




$$\boxed{T_c - T \sim [\text{densité du liquide} - \text{densité du gaz}]^2}$$

REVOLUTION D'ONSAGER (Modèle d'Ising)

Energie = nombre de paires de voisins occupés sur le réseau



$$\boxed{\mathrm{Pro}(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z} \exp\left[-\frac{E(\mathcal{C})}{kT}\right]}$$

$$\boxed{E(\mathcal{C}) = -\sum_{iVj} \eta_i \eta_j \qquad \eta_i = 0 \text{ ou } 1}$$

$$\rho_{\text{liquide}} - \rho_{\text{gaz}} = \left[1 - \left(\sinh \frac{1}{2kT}\right)^{-4}\right]^{\frac{1}{8}}$$

Onsager 1944 Yang 1952

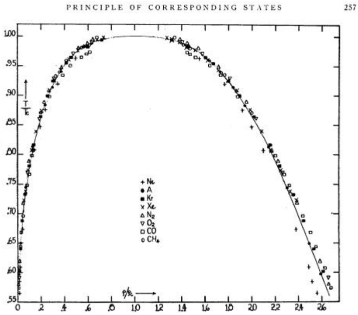
$$\boxed{T_c - T \sim [(\text{densité du liquide}) - (\text{densité du gaz})]^8}$$

UNIVERSALITE

$$\boxed{T_c - T \sim [(\text{densité du liquide}) - (\text{densité du gaz})]^{b}}$$

- l'exposant b est universel
  - $b = 8$ en dimension $d = 2$
  - $b \simeq 3$ en $d = 3$
  - $b = 2$ en $d \geq 4$
- Pas de transition en $d = 1$
- Rôle des fluctuations $\Longrightarrow$ Groupe de renormalisation

T/T_c



ρ/ρ_c

Guggenheim 1945

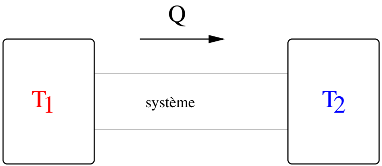
LES SYSTEMES HORS D'EQUILIBRE

A l'équilibre:

$$\boxed{\mathrm{Pro}(\mathcal{C}) = \frac{1}{Z} \exp\left[-\frac{E(\mathcal{C})}{kT}\right]}$$

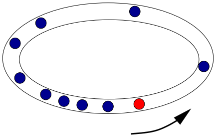
Hors d'équilibre:

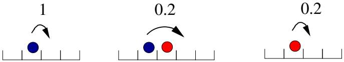
$$\boxed{\mathrm{Pro}(\mathcal{C}) = {\color{red}?}}$$



TRANSITIONS DE PHASE A UNE DIMENSION

Trafic

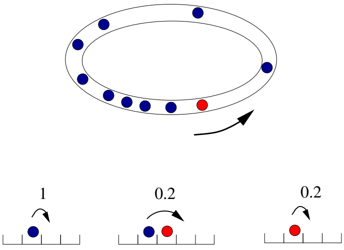


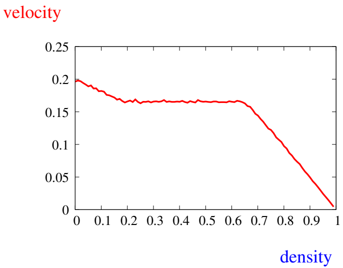


vitesse

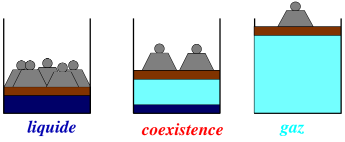
TRANSITIONS DE PHASE A UNE DIMENSION

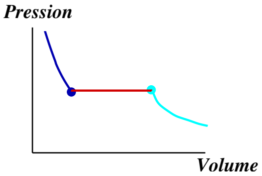
Hors équilibre



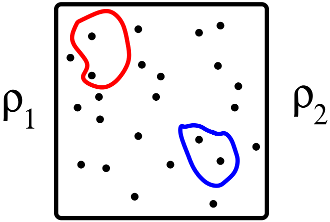


Equilibre





FLUCTUATIONS DE DENSITE



n atomes dans v
n' atomes dans v'

Equilibre $(\rho_1 = \rho_2)$ Théorème de fluctuation-dissipation

- Pas de corrélation à longue portée
- Fluctuations de densité Gaussiennes: n est Gaussien
- Grandes déviations de n données par l'énergie libre

Hors équilibre $\rho_1 \neq \rho_2$

- Corrélations à longue portée: (entre n et n')
- L'énergie libre est non locale
- Fluctuations non Gaussiennes de densité: n est non Gaussien

CONCLUSION

- Passage du microscopique au macroscopique pour les sytèmes hors d'équilibre
- Fluctuations en physique
- Caractère probabiliste du second principe
- "Violations" du théorème de fluctuation-dissipation
- Applications bien au delà de la physique (comportements, trafic, biologie: repliement des protéines, réseaux de neurones, moteurs moléculaires, ... évolution)