Physique hors d'équilibre et transport

K. Mallick

Institut de Physique Théorique, CEA Saclay (France)

ENS Ulm, le 24 Mars 2018

1. LA THERMODYNAMIQUE CLASSIQUE

2. LA PHYSIQUE STATISTIQUE D'ÉQUILIBRE

3. LES SYSTÈMES HORS D'ÉQUILIBRE

THERMODYNAMIQUE

LA THERMODYNAMIQUE

La thermodynamique décrit les propriétés macroscopiques de la matière (solide, fluide, radiation...) en fonction d'un petit nombre d'observables macroscopiques et permet d'établir entre celles-ci des relations générales indépendamment de la structure atomique sous-jacente.

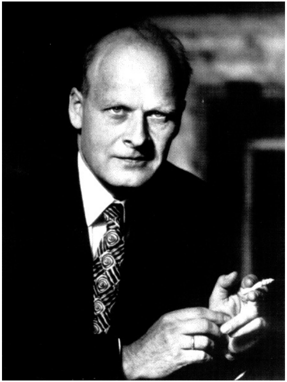
La thermodynamique classique ne considère que des situations d'équilibre, ou états, du système : *le temps n'y apparaît pas en tant que variable.*

LA THERMODYNAMIQUE est la science des CONVERSIONS d'ÉNERGIE:

- Il faut IDENTIFIER correctement les diverses formes d'énergie pour aboutir à un bilan exhaustif (1er Principe).

- Les formes d'énergie ne sont PAS toutes ÉQUIVALENTES : certaines conversions ont un coût qui nécessite une *compensation* (Clausius).

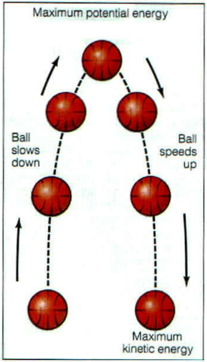
Lars Onsager (1903-1976)



'As in other kinds of bookeeping, the trickiest questions that arise in the application of thermodynamics deal with the proper identification and classification of the entries; the arithmetics is straightforward' (Onsager, 1967).

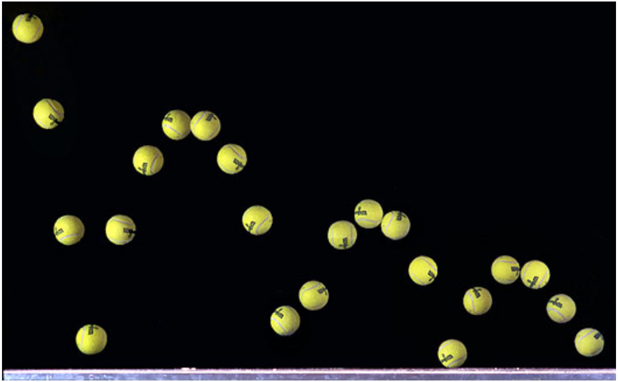
Conversion de l'Énergie Mécanique

Figure 16–12 *As a basketball player throws the ball in the air, various energy conversions take place. What are these conversions?*



Quelle hauteur maximale un(e) perchiste peut atteindre ?

Où est passée l'énergie ?

X


LE PREMIER PRINCIPE

$$\boxed{\Delta U = W + Q}$$

L'ÉNERGIE DE L'UNIVERS EST CONSTANTE.

Réversibilité

Les processus mécaniques non-dissipatifs sont réversibles avec le temps : le mouvement d'un pendule ne permet *pas* de savoir si un film est projeté à l'endroit ou à l'envers.

Le mouvement parfaitement périodique d'un métronome découpe le temps en durées bien définies mais le sens de l'écoulement du temps est perdu...

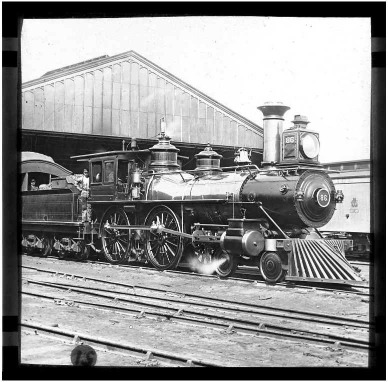
IRREVERSIBILITÉ

En présence de dissipation et d'échanges de chaleur, la réversibilité temporelle semble perdue.

CERTAINS ÉVÉNEMENTS SEMBLENT POSSIBLES MAIS PAS D'AUTRES !

Comment distinguer les processus possibles de ceux qui ne le sont pas ?

SADI CARNOT (1796-1832)



Il existe au rendement d'une machine à vapeur une limite intrinsèque, impossible à dépasser *(Réflexions sur la puissance motrice du feu, 1824).*

ARCHÉTYPES DE PROCESSUS IMPOSSIBLES

No process is possible whose *sole* result is the transfer of heat from a cooler body to a hotter body (Clausius).

No process is possible whose *sole* result is the absorption of heat from a reservoir and the conversion of this heat into work (Kelvin-Planck).

LE SECOND PRINCIPE

Clausius définit un nouveau concept de la Physique : L'ENTROPIE.

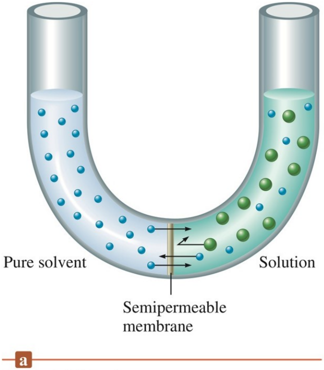
$$\boxed{S_2 - S_1 \geq \int_{1\to 2} \frac{\partial Q}{T}}$$

Inégalité de Clausius (1851)

L'ENTROPIE DE L'UNIVERS CROÎT.

La compétition entre énergie et entropie régit de nombreux phénomènes familiers (changements d'état ou transitions de phase).

LA PRESSION OSMOTIQUE



Compétition entre énergie et entropie

Un système à l'équilibre thermique, à température T, à tendance à minimiser son énergie et maximiser son entropie.

Une manière pratique de tenir compte de cette double contrainte est d'utiliser une fonction d'état qui tient compte simultanément des deux principes. Il s'agit de **L'ÉNERGIE LIBRE F :**

$$\boxed{F = U - TS}$$

L'énergie libre a une interprétation physique essentielle : c'est le travail maximal qu'on puisse extraire d'un système thermalisé à température T.

PHYSIQUE STATISTIQUE

THÉORIE MOLÉCULAIRE DE LA CHALEUR

L. Boltzmann

J. C. Maxwell

FORMULE DE BOLTZMANN

Selon Boltzmann, l'entropie est un comptage combinatoire des états microscopiques sous-jacents à une situation macroscopique donnée.

$$\boxed{S = k \log \Omega}$$

$$k = \frac{R}{\mathcal{N}}$$

Une vision probabiliste du monde

Les observables thermodynamiques sont des moyennes sur des quantités microscopiques, **distribuées selon des lois de probabilité.**

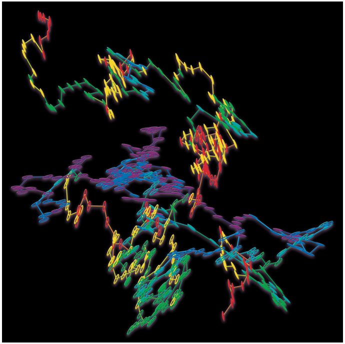
Ainsi, pour un système à température T, la probabilité d'observer une configuration microscopique $\mathcal{C}$ d'énergie $E(\mathcal{C})$ est donnée par :

$$\boxed{P_{\mathrm{eq}}(\mathcal{C}) = \frac{\mathrm{e}^{-E(\mathcal{C})/kT}}{Z}}$$

Cette loi **canonique** donne accès à la thermodynamique du système et à son état macroscopique : sa phase (solide, liquide, gaz), ses proprietés magnétique, optiques, mécaniques...

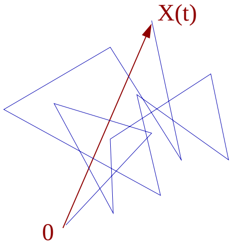
Le monde commença à lui apparaître sous un jour nouveau. Comme une vaste entreprise dynamique, en fluctuation perpétuelle, modelée et remodelée sans cesse, et non ainsi qu'elle l'avait cru inconsciemment pendant des années, comme l'entité stable dans laquelle on pouvait piocher sans effort (T. Tejpal, Loin de Chandigarh, 2005).

Le Mouvement Brownien



Robert Brown (1773-1858)

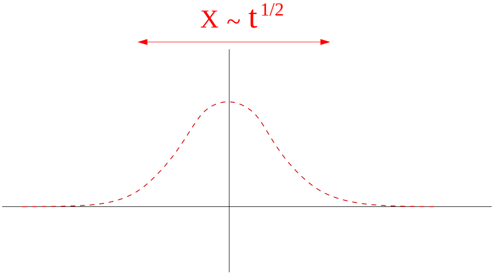
La particule brownienne est secouée sans relâche par des chocs avec les molécules d'eau : elle se comporte comme un marcheur ivre.



$$\langle X^2 \rangle = 2\,D\,t$$

La particule brownienne diffuse autour de sa position initiale et les positions qu'elle occupe se répartissent selon une Courbe de Gauss.

Le mouvement Brownien est un phénomène universel résultant de la divisibilité finie de la matière, i.e. de l'existence des atomes.



La courbe de Gauss

L'universalité des propriétés statistiques explique l'existence de lois émergentes qui décrivent les comportements collectifs de systèmes formés d'un grand nombre de constituants élémentaires.

LA RÈGLE DU JEU

Beaucoup de phénomènes collectifs ne dépendent pas de la forme précise des lois ni des constituants à l'échelle microscopique.
Exemples : les changements d'états, les équations du mouvement d'un fluide...

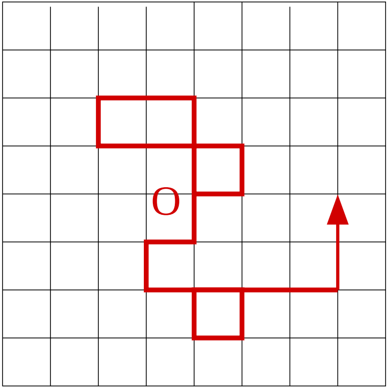
Donc, un modèle, même s'il est *ultra-simplifié* au niveau microscopique, peut parfaitement reproduire et décrire *correctement* la physique à notre échelle, à condition d'être

(i) Assez *riche* pour "capturer" la physique.

(ii) Assez *simple* pour être analysable ou calculable.

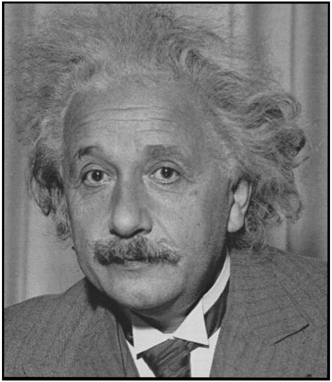
'Make everything as simple as possible, but not simpler' (Einstein).

Le Marcheur au hasard



$$\text{DISTANCE TYPIQUE} \sim \sqrt{\text{PAS}}$$

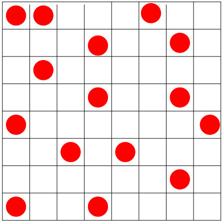
La Formule d'Einstein



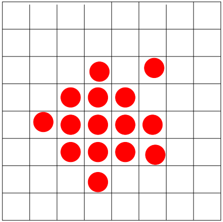
$$\boxed{D = \frac{RT}{6\pi\eta a \mathcal{N}}}$$

R Constante des gaz parfaits
T Température
η viscosité de l'eau
a diamètre du grain
$\mathcal{N}$ Nombre d'Avogadro

L'empereur des modèles: Le Modèle d'Ising



Haute Temperature



Basse Temperature

EN PHYSIQUE STATISTIQUE, TOUTES LES CONFIGURATIONS DOIVENT ÊTRE PRISES EN COMPTE.

TRANSITION DE PHASE

À chaque configuration est associée une énergie :

ÉNERGIE = NOMBRE de PAIRES de BILLES VOISINES

La probabilité d'occurrence d'une configuration dépend de la température T. Elle est donnée par une formule découverte par Boltzmann

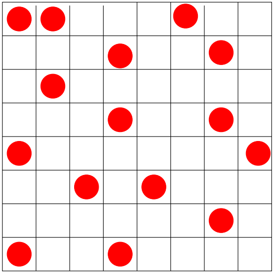
$$\boxed{\text{Proba d'une configuration} = \mathrm{e}^{\text{ENERGIE}/\text{T}}}$$

Cette formule dépend de la température T :

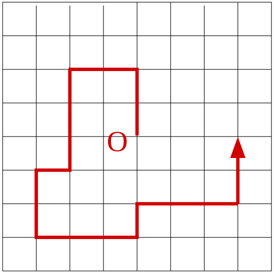
- à très haute température, $T \to \infty$, chaque configuration contribue à part égale : on a un *gaz.*
- En abaissant la température, on favorise fortement les configurations avec des billes regroupées : on obtient une *phase condensée (liquide).*

Il se produit *une transition de phase* à une température critique T_c : *changements d'état* de la matière, *magnétisme...*

Un Poymère comme AVATAR de Ising



ISING



POLYMERE

Pierre-Gilles de Gennes (1932-2007)

Bilan sur la Physique d'équilibre

Les lois de la thermodynamique sont entièrement comprises dans le cadre conceptuel de la physique statistique.

A la suite des travaux d'Einstein et d'Onsager, il est apparu que l'équilibre thermodynamique satisfait la **réversibilité temporelle**.

Cette propriété de réversibilité temporelle est fondamentale et universelle : elle caractérise tous les systèmes à l'équilibre.

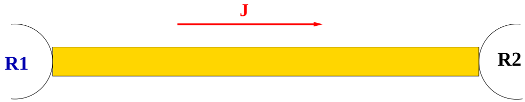
Ainsi à l'équilibre thermodynamique, la valeur moyenne de chacun des **flux échangés** entre un système et son environnement (matière, charge, spin...) est nécessairement **nulle.**

PHYSIQUE HORS D'ÉQUILIBRE

Dans la Nature, de nombreux systèmes sont très loin de l'équilibre thermodynamique et ne cessent d'échanger des courants avec leur environnement. Il n'existe aucun cadre conceptuel général pour les étudier.

Transport: un paradigme du non-équilibre

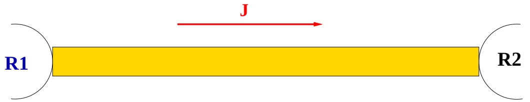
Considérez un système physique en contact avec deux réservoirs de températures différentes : il n'y a pas de théorie microscopique !



L'existence d'un courant (transport) **brise** la réversibilité temporelle : les lois de la thermodynamique sont caduques. Comment décrire un tel système ?

Transport: un paradigme du non-équilibre

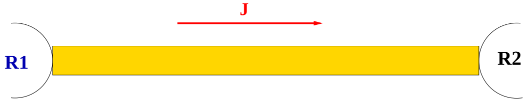
Considérez un système physique en contact avec deux réservoirs de températures différentes : il n'y a pas de théorie microscopique !



L'existence d'un courant (transport) **brise** la réversibilité temporelle : les lois de la thermodynamique sont caduques. Comment décrire un tel système ?

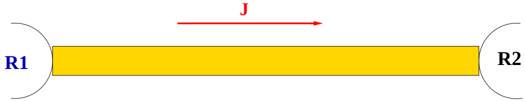
- Quelles observables macroscopiques pour caractériser l'état stationnaire ? (densité, pression, courants...)
- Quelles fonctions 'd'état', en lieu et place des potentiels thermodynamiques, à optimiser dans l'état stationnaire ?
- Existe-t-il des lois macroscopiques universelles ?
- Qu'est-ce qui remplace la loi canonique de Boltzmann-Gibbs ?
- Comment quantifier les fluctuations ? Sont-elles encore Browniennes ?

Voici le schéma fondamental d'un système hors d'équilibre

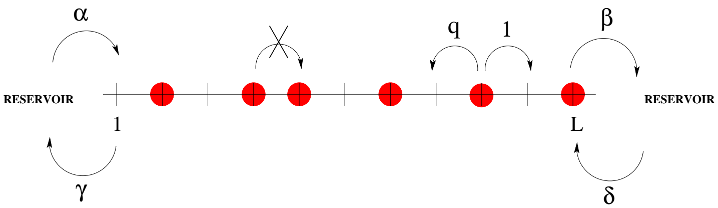


Modélisation du transport classique

Voici le schéma fondamental d'un système hors d'équilibre

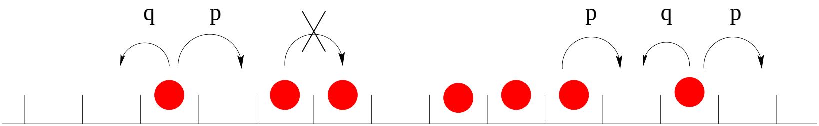


Celui-ci s'incarne en un modèle élémentaire de transport (classique) : le processus d'exclusion simple asymétrique (ASEP).



Des milliers d'articles de recherche ont été consacrés à ce modèle !

ASEP: Paradigme du non-équilibre



Asymmetric Simple Exclusion Process (ASEP): un modèle minimal pour comprendre les systèmes hors d'équilibre.

- EXCLUSION: Interaction effective entre particules.

- ASSYMÉTRIE: Brise le renversement temporel.

- PROCESSUS: Chaque particule est un marcheur ivre. Aucune notion d'énergie sous-jacente.

Un modèle pour la synthèse des protéines

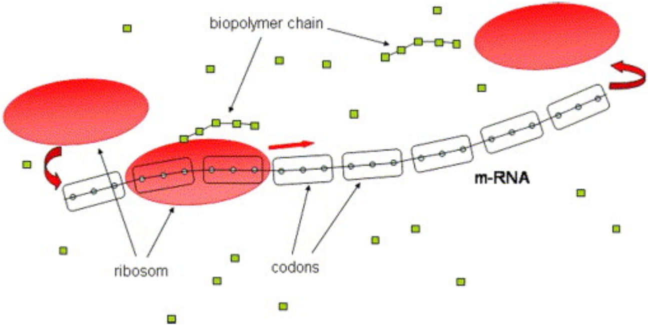
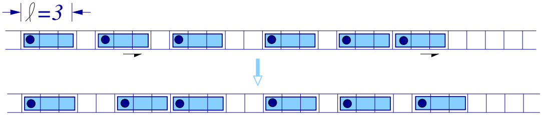
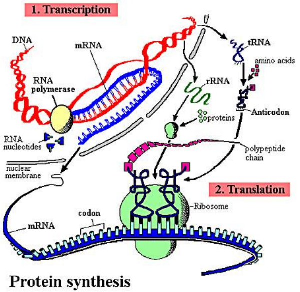


Figure by Andreas Schadschneider

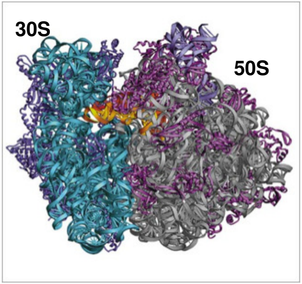
C. T. MacDonald, J. H. Gibbs and A.C. Pipkin, Kinetics of biopolymerization on nucleic acid templates, *Biopolymers* (1968).



“The central dogma of molecular biology”



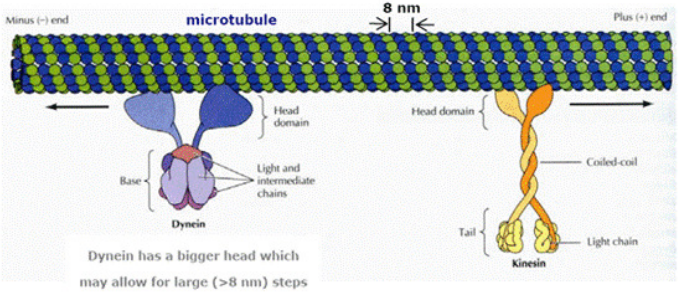
(a)

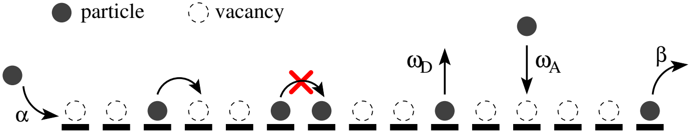


(b)

(c)

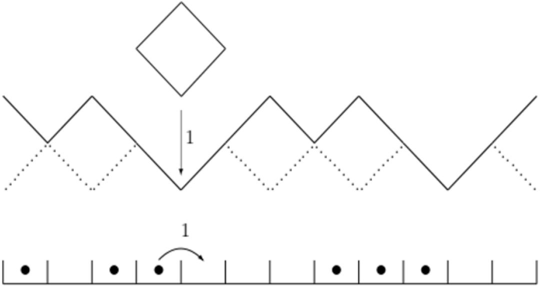
Moteurs moléculaires et dynamique de Langmuir





Travaux d'E. Frey, A. Parmeggiani et al.

L'équation de Kardar-Parisi-Zhang



La hauteur de l'interface satisfait une équation dite équation de KPZ

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu \frac{\partial^2 h}{\partial x^2} + \frac{\lambda}{2} \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 + \xi(x, t)$$

ASEP est une version discrétisée de cette équation universelle.

ORIGINES

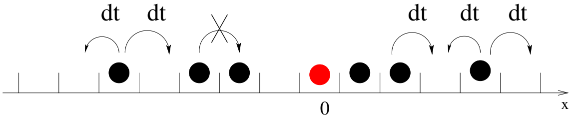
- Mouvements Browniens en interaction.
- Transport de Macromolécules dans des vaisseaux capillaires.
- Conductivité électronique dans des solides anisotropes.
- Reptation de polymères.
- Croissance d'interfaces.

APPLICATIONS

- Trafic routier.
- Alignement de séquences d'ADN.
- Moteurs cellulaires (kinésine)

Diffusion anormale d'une particule

Observons le mouvement de la particule rouge qui se trouvait initialement en 0 et appelons X_t sa position à l'instant t.



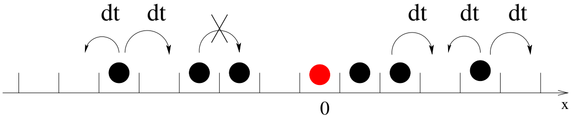
En moyenne, on a $\langle X_t \rangle = 0$, mais que dire de la variance ?

- Nous savons, depuis Einstein, que si les particules n'interagissaient pas (pas de principe d'exclusion), alors elles diffuseraient :

$$\langle X_t^2 \rangle = Dt$$

Diffusion anormale d'une particule

Observons le mouvement de la particule rouge qui se trouvait initialement en 0 et appelons X_t sa position à l'instant t.



En moyenne, on a $\langle X_t \rangle = 0$, mais que dire de la variance ?

- Nous savons, depuis Einstein, que si les particules n'interagissaient pas (pas de principe d'exclusion), alors elles diffuseraient :

$$\langle X_t^2 \rangle = Dt$$

- Ici, du fait de la contrainte d'exclusion, une particule montre un comportement de diffusion anormale :

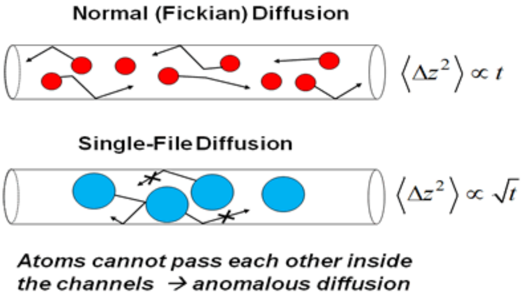
$$\langle X_t^2 \rangle = 2\frac{1-\rho}{\rho}\sqrt{\frac{Dt}{\pi}} \qquad \text{(Arratia, 1983)}$$

Cependant, la loi de distribution de X_t est inconnue.

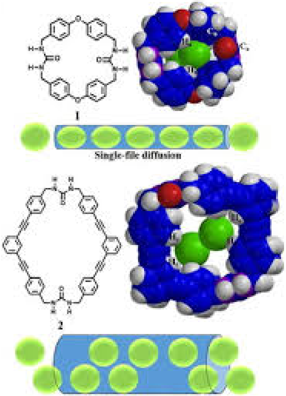
Diffusion anormale et matière condensée

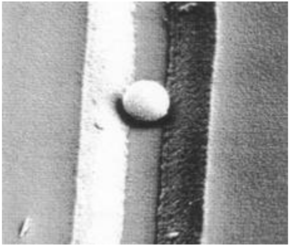
La diffusion en file-unique est un phénomène important en physique de la matière condensée qui apparaît dans de nombreuses expériences (transport de macromolécules biologiques, nanotubes de carbone).

Le modèle d' exclusion permet de le comprendre : les fluctuations d'une particule avec exclusion ont un "scaling" en $t^{1/4}$ (et non en $t^{1/2}$).



Réalisations expérimentales

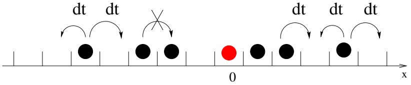


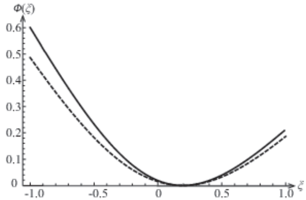


(Groupe de C. Bechinger à Stuttgart)

Calcul explicite de la loi de la position

Solution d'un problème ouvert depuis 40 ans !





La loi de X_t s'obtient à partir de la fonction

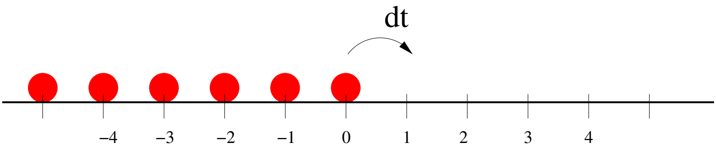
$$F(\xi,\lambda) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\rho\omega)^n}{n^{3/2}} A(\sqrt{n}\,\xi) + \xi \log \frac{1+\rho(e^{\lambda}-1)}{1+\rho(e^{-\lambda}-1)}$$

où la fonction $A(u)$ est la double primitive de la Gaussienne.

Cela permet de calculer toutes les caractéristiques de X_t.

Lois statistiques du courant

Supposons que toutes les particules se trouvent à gauche au temps initial et qu'elles ne peuvent sauter que vers la droite. Que vaut le nombre total de particules Q_t passées dans la région de droite au bout d'un temps t ?



Il existe une formule explicite pour la probabilité de Q_t :

$$\mathrm{Prob}(Q_t \geq N) = \frac{1}{\mathcal{Z}_N} \int_{[0,t]^N} \mathrm{d}^N x \prod_{1 \leq i < j \leq N} (x_i - x_j)^2 \prod_{i=1}^{n} \mathrm{e}^{-\mathrm{x_i}}$$

De telles formules sont bien connues en physique et en mathématiques : ce sont des intégrales de Selberg.

La loi de Tracy-Widom

Quand $t \to \infty$, la statistique de Q_t présente des propriétés remarquables, liées à des questions de combinatoire et d'algèbre des groupes symétriques (K. Johansson, 2000).

La loi asymptotique du courant est donnée par :

$$Q_t = \frac{t}{4} + \frac{t^{1/3}}{2^{4/3}}\,\xi_{TW}$$

Ici, ξ_{TW} est une variable aléatoire qui est distribuée non pas selon Gaussienne mais suivant une nouvelle formule universelle dite de Tracy-Widom :

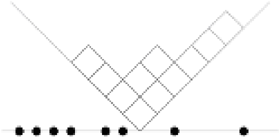
$$\text{Prob}\,(\xi_{TW} \leq s) = 1 - F_2(-s)$$

$$\text{avec} \qquad F_2(s) = \exp\left(-\int_s^{\infty}(x-s)\,u(x)^2 dx\right)$$

$u(x)$ est la solution de l'équation de Painlevé II, $u'' = xu + 2u^3$, asymptote à la fonction d'Airy.

Lien avec la combinatoire

On représente le processus d'exclusion comme un tableau de partition.



La position de la première particule correspond à la longueur de la ligne la plus basse du tableau et ainsi de suite.

Les partitions d'un entier $(11 = 6 + 3 + 1 + 1)$ sont très étudiées en arithmétique. Ainsi, les propriétés statistiques du plus grand chiffre de la partition (ici 6) propriétés sont reliées au **problème d'Ulam :**

Prenons une permutation aléatoire σ de (1,2,3,4,...,11) :

2 5 1 3 9 11 7 4 10 6 8

et extrayons-en une sous-suite croissante, par exemple (2,3,4,6,8). Soit $l(\sigma)$ la longueur de la plus grande sous-suite croissante ainsi construite.

Que dire des propriétés statistiques de $l(\sigma)$?

Ulam et le jeu de la réussite

Il a été démontré que par Baik-Deift-Johansson (circa 2000)

$$l(\sigma) = 2\sqrt{n} + n^{1/6}\,\xi_{TW}$$

COMMENT ?

• Il existe une bijection exacte entre le problème d'Ulam, les partitions d'entiers et le modèle d'exclusion.

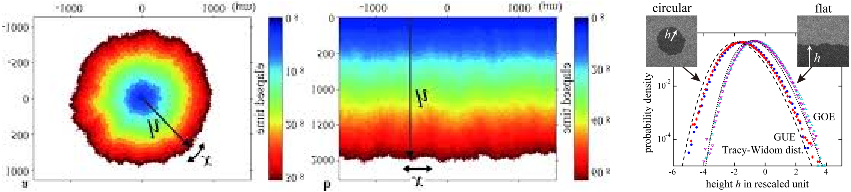
• Cette correspondance peut s'exprimer en termes d'algorithmes de tri, analogues à ceux du jeu de carte, dit 'la réussite' (Aldous and Diaconis, 1999).

Croissance d'interfaces et universalité

L'étude des modèles de transport a conduit à une solution exacte du problème de la croissance d'une interface à une dimension (KPZ).

La Loi de Tracy-Widom y joue un rôle fondamental. Son ubiquité dans des domaines variés de la Physique et des Mathématiques lui confère un statut privilégié.

Cette Loi de Tracy-Widom a été mesurée dans des expériences sur des cristaux liquides par Takeuchi et Sano en 2010.



CONCLUSION

La physique théorique élabore des modèles afin de comprendre des phénomènes naturels et cherche des stratégies pour les résoudre.

Malgré (*ou plutôt du fait de*) leur simplicité, ces modèles recèlent de magnifiques structures mathématiques, au cœur de l'universalité des lois de la physique.

Ainsi, la physique statistique hors d'équilibre recouvre des thèmes extrêmement variés :

- Transitions de Phases et systèmes désordonnés.
- Magnétisme ; Supraconductivité ; Superfluidité.
- Polymères ; cristaux liquides ; biophysique.
- Processus Browniens et théories conformes.
- Réseaux de communication, trafic routier, épidémiologie, dynamique des populations, modèles d'urbanisme...

CONCLUSION

La physique théorique élabore des modèles afin de comprendre des phénomènes naturels et cherche des stratégies pour les résoudre.

Malgré (*ou plutôt du fait de*) leur simplicité, ces modèles recèlent de magnifiques structures mathématiques, au cœur de l'universalité des lois de la physique.

Ainsi, la physique statistique hors d'équilibre recouvre des thèmes extrêmement variés :

- Transitions de Phases et systèmes désordonnés.
- Magnétisme ; Supraconductivité ; Superfluidité.
- Polymères ; cristaux liquides ; biophysique.
- Processus Browniens et théories conformes.
- Réseaux de communication, trafic routier, épidémiologie, dynamique des populations, modèles d'urbanisme...

Et il demeure de très nombreuses terres à découvrir !