

LP 2020 – Entropie Statistique

16 mai 2021

Clément Gidel & Pascal Wang

Niveau :

Commentaires du jury

Bibliographie

📖 *Le nom du livre, l'auteur*¹

→ Expliciter si besoin l'intérêt du livre dans la leçon et pour quelles parties il est utile.

Prérequis

- Thermo classique
- Facteur de Boltzmann
- Mécanique analytique

Expériences

- ☞ Biréfringence du quartz

Table des matières

Préparation

Contexte historique, but et approche de la phystat

La backstory : Notion de micro états, macro états, indiscernabilité avec exemple de cristal dénombrement et loi binomiale : seul l'état le plus probable est représenté.

L'entropie statistique : Formule de Shannon, , exemple introductif du billet sous la table, vérification des propriétés microétats accessibles, Postulat fondamental microcanonique, (Ergodicité, Fluctuation,)

On retrouve et comprend mieux ce que l'on fait : Température statistique/thermodynamique (pourquoi en choisit k_B ou $\ln 2$), (flux de chaleur ; Pression statistique,) Interpretation du premier principe, entropie du GP classique/statistique pour transition vers gay lussac ?

Exemples : Détente de Joule-Gay Lussac et irréversibilité , Cristal paramagnétique parfait, (Modèle simple de polymère, Gaz Parfait classique,) Exemples "qualitatifs" : Paradoxe de Gibbs, Démon de Maxwell, principe de Landauer (Exemple + Simus marrante sur l'irréversibilité : urnes d'ehrenfest)

Conclusion : take home message : L'entropie statistique permet une interprétation macroscopique de l'entropie thermodynamique. Lien avec la théorie de l'information développée par Claude Shannon : "S mesure notre manque d'information sur le microétat du système".

Ouverture : Soit classique vers l'ensemble microcanonique, soit vers la recherche sur la physique de l'information, principe de Landauer (mon sujet de stage)

Plan : Clément

On suit le plan de Nicolas Barros qui est TB en mentionnant l'ergodicité pour faire le pont entre la physique et les calculs (cf rapport des correcteurs). Les animations Python sont définitivement à garder. **Où placer ergodicité ? Probablement en sous partie avant le III**

Intro : Faire une motivation de l'approche statistique (🔴 **La première fois qu'on emploie le mot "statistique" il faut être extrêmement clair.**) avec l'exemple de 1 cm³ d'air qu'on veut caractériser (avoir des infos sur le système). Montrer qu'on a beaucoup trop de degrés de libertés, insolvable. La notion de statistique, moyenne d'ensemble apparaît naturellement.

I) Description probabiliste et entropie statistique.

C'est bien de partir de cet exemple du cristal paramagnétique **classique**, on peut refaire le pont avec l'énormité du nombre d'Avogadro. **Faire aussi des exemples avec $N=2$ pour expliquer comment compter micro et macro état (cf rapport de N.Barros)**

1) Micro-états, macros-états, particules indiscernables. Micro et macro état sont des def naturelles : on veut connaître notre système, ce qui passe par une connaissance micro mais le macro est constitué de beaucoup de sous cas du micro. **Enoncer le terme espace des phases pour (r,p)** . La notion d'indiscernabilité est un peu subtile je trouve, à voir si on en parle dès le début,...

2) L'entropie statistique vue comme le manque d'information est assez bien introduite : on a beaucoup d'états macro possibles, mais comment savoir dans lequel on va se trouver ? **Parler de Shannon. Mentionner aussi le préfacteur qui peut être la constante de Boltzmann.** L'exemple du billet permet de sentir que ce manque d'info va faire intervenir le log avec la dichotomie. Je pense qu'avant de donner la def il faut dire les prop qu'on attend de cette fonction et faire sentir que c'est le log avec l'expérience du billet. La démo avec les multiplicateurs de Lagrange est élégante pour remonter à la distribution de Boltz. Dans ce cas là, il faut mettre facteur de Boltz en prérequis et dire qu'on obtient bien qqch de cohérent avec ce qu'on a eu précédemment en thermo classique.

II) Approche micro-canonique

1) Système isolé et postulat fondamental. **Préciser qu'on est dans l'ensemble micro canonique.** On fait qq notions importantes, système isolé, postulat fondamental. L'idée est d'ensuite revenir sur l'exemple du cristal paramagnétique pour illustrer les conséquences du postulat fondamental avec le code Python (c'est juste une histoire de dénombrement en fait **Mentionner que c'est en fait le théorème central limite. On peut aussi donner l'odg des fluctuations en $\sqrt{N}$ et donner des valeurs typique de N**).

2) Ergodicité. On définit l'ergodicité et on dit pourquoi c'est important de se placer dans ce cas là. On peut s'aider du rapport de la leçon. Il peut être bien de trouver une animation pour illustrer c'est quoi l'ergodicité. <https://qdyn.ist.ac.at/research/weak-ergodicity-breaking/> la balle dans le billard va finir par explorer tout l'espace, la moyenne temporelle c'est la même que la moyenne statistique car on explore toutes les configurations. Mentionner la pseudo ergodicité ? (on pourrait s'attirer des sales questions...)

III) Thermo classique.

1) Température. On utilise l'extensivité de l'entropie qui sort naturellement de sa def en log pour montrer qu'on a compatibilité avec la température classique. **Important : Parler de limite thermodynamique pour décrire l'égalité des températures. On peut aussi envisager de faire l'approche canonique pour avoir une relation simple entre température et entropie ? (cf rapport)**

2) Retour sur le GP. **Facultatif à mon sens, ça devrait sauter** On veut montrer qu'on retrouve les expressions dérivées des identités thermo avec la def stat de l'entropie, c'est pas mal. Bien expliquer qu'on fait la même chose avec une approche différente !

3) Détente de Joule Gay-Lussac. L'animation est top !! On peut pleinement discuter du clacul statistique. Dire que le retour à l'état initial est pas impossible mais juste improbable c'est bien.

4) Applications et paradoxes. Partie très tricky, on aura probablement pas énormément de temps, le mieux selon moi serait de faire seulement rapidement l'application du cristal paramagnétique qui est rapide si on donne juste des ingrédients et les résultats. Suivi d'une application du genre Démon de Maxwell.

Compléments/Questions

Passage

Passage : Nicolas Barros

Plan

Prérequis : Mécanique analytique, thermo classique

Intro : Immensité du nombre d'avogadro, description probabiliste obligée. I) Description probabiliste de l'entropie statistique. Exemple des atomes d'un cristal paramagnétique. 1) Micros-états, macros-états et indiscernabilité. Dfs de micro états, macro états. Fil rouge avec le cristal para : c'est par exemple l'aimantation. Pour une aimantation donnée, par exemple $M = \mu_b(N_+ + N_-)$ on a $\Omega = (NN_+)$ le nombre de micros états qui donne le macro état correspondant. On def alors $S = -\lambda \sum_i P_i \ln(P_i)$. Caractéristiques d'une telle fonction : $S > 0$ minimale quand $S = 0$, symétrie de deux évènements, quand on ajoute un ev impossible on change rien, le manque d'information du système double est le double du manque d'info du système simple, S est max quand tous les ev sont équiprobables.

C'est alors comme un problème de mécanique analytique, on veut extremaliser l'action $F(P_1, \dots) = S - c \sum_i P_i$. Les équations d'Euler Lagrange donnent que $\partial F / \partial P_i = 0$ et donc que $P_i = e^{-c/\lambda}$.

2) Système isolé et postulat fondamental. Dans l'ensemble microcanique (E cst, isolé), tous les états sont équiprobables (postulat fondamental). La proba vaut donc $P = 1/\Omega$ si on est à la bonne énergie et au bon nombre de particules. On obtient alors la formule de l'entropie $S = k_b \ln(\Omega)$. On a la probabilité de trouver une certaine valeur de l'aimantation qui devient de plus en plus piquée à la limite thermo (on a pas défini ce terme c'est moi qui l'utilise). On veut une expression analytique : $S = k_b \ln((NN_+)) \sim \dots$ PAs très clair, on trace l'évolution de l'entropie selon c ?

II) Lien avec la thermo classique. 1) Température. On découpe le système en deux sous système. L'entropie est additive donc on somme les entropies qui s'expriment selon $\Omega(U_{1/2})$. Comme le système total est à l'équilibre la dérivée de l'entropie selon la température est nulle donc avec la def thermo de la température on a l'égalité des températures des deux sous systèmes.

2) Relations avec le GP. La différentielle de l'entropie s'exprime avec les variables d'état T et V , ce qu'on retrouve avec la formule statistique : $dS = NdV/V$.

3) Detente de Joule et Gay Lussac. On montre un animation où on fait passer des particules dans un volume de V à $2V$. On a une variation d'entropie OK, il y a retour à l'EI possible mais infiniment peu probable, il faudrait attendre l'âge de l'univers.

III) Applications et paradoxes .1)Système paramagnétique. On peut réécrire l'entropie avec sa formule statistique, définir la température, l'énergie interne. Gros calculs de U , T pour obtenir $M = Nth(\mu_b B \beta)$. On retrouve la loi de Curie aux hautes températures.

2) Paradoxe de Gibbs (pas le temps il faudrait souligner ce qu'on a appris jusqu'à maintenant). On a un compartiment séparé en $2V$ avec dans chacun des particules. On enlève la cloison, mais le système n'a pas changé, mise en lumière de la discernabilité des particules.

Commentaires

- Paramagnétique/ferro en prérequis ?
- Pas de gros commentaire quand on obtient les proba qui sont des facteurs de Boltz : compétition entre énergie ? et énergie thermique.
- L'application est bien (cristal paramagnétique).
- Mettre un peu plus clair la différence micro macro état en explicitant avec des exemples simples.

Questions

- Pour décrire le système on a besoin de vitesse et positions, vocabulaire ? On a besoin de l'espace des phases.
- Les spins dans le cristal sont random ? Sur l'axe mais random yes. Modèle utilisé ? Ça marche dans quel approx ?
- En vrai il faudrait considérer dans le modèle microcanonique des énergies entre E et $E + \delta E$, mais cadre quantique nécessaire.
- Entropie de l'info ? Entropie de Shanon.
- ODG de k_b à T_{amb} .
- Cristal paramagnétique, aspects si quantique (échange entre spin, délocalisations). Modèle de gaz sur réseau possible avec plusieurs atomes sur la même case. Modèle d'Ising.

- Signification de 2 particules discernables ? L'échange des deux particules amène à un nouvel état.
- Diff entre micro et macro état ? Macro état relatif aux observables alors que micro relatif aux constituants microscopiques.
- Hypothèses sur les calculs probabilistes ?
- ODG des fluctuations sur la gaussienne ? L'écart type c'est proportionnel à $1/\sqrt{N}$. Quand on tire une valeur c'est autour de la valeur moyenne avec une proba ? C'est pas clair
- Signification d'ergodique dans l'espace des phases ? On passe pas partout mais on passe infiniment proche de tous les états (théorème de Poincaré ? ? ? ?).
- Autres ensembles canoniques ? Utilité spécifique ?
- Discussion des propriétés de l'entropie avec l'exemple de 'va-t-il pleuvoir demain ?'
- Entropie fonction d'état en terme d'information ?
- Une fonction d'état est une fonction qui dépend des variables d'état.
- Entropie dans l'ensemble canonique ? A partir de $S = -P_i \sum_i \ln(P_i)$ et les $P_i = 1/Z e^{U/kT}$ alors on peut calculer $S = k_b \ln(Z) + \langle E \rangle / T$. On peut alors définir la température en inversant.
- Lien entropie / brisure de symétrie du système ? QQch qui est conservé
- On parle de manque d'information si on à accès à l'info!! Typiquement si je suis aveugle j'ai pas accès aux couleurs. Entropie de Shannon et entropie de thermo coïncident mais c'est différent. Il faut utiliser des notations différentes pour être rigoureux. De même avec la température, avec l'entropie c'est une température statistique. Faire un phrase où on assimile les deux températures.
- Théorème central limite essentiel, ergodicité essentiel.