

Limites du principe de Landauer et du second principe de la thermodynamique

Limits of Landauer's principle and of the second law of thermodynamics

Jean Argouarc'h¹

¹ Chercheur indépendant, jr.argouarch@gmail.com

RÉSUMÉ. Depuis 1857, le second principe de la thermodynamique est confronté au défi d'un démon, imaginé par Maxwell, qui serait capable de diminuer l'entropie d'un gaz à l'aide d'une information sur son état. La réponse généralement admise à ce défi suggère que l'effacement de cette information compenserait, selon le principe de Landauer, la réduction d'entropie obtenue par le démon. Des expériences récentes portant sur des systèmes physiques à deux états, soumis à des fluctuations thermiques à l'échelle nanoscopique, ont cherché soit à prouver le principe de Landauer, soit à réaliser une machine de Szilard ou un démon de Maxwell. Nous avons écrit les équations et développé un modèle numérique permettant d'observer et de comprendre l'évolution de ces systèmes. Les résultats montrent que l'entropie thermodynamique et l'entropie d'information ne sont pas équivalentes. Ils démontrent également que le principe de Landauer a un domaine d'application limité et que, grâce à une mémoire à deux états, il est possible d'éliminer une faible quantité d'entropie sans dépenser d'énergie, ce qui constitue une violation locale du second principe de la thermodynamique à l'échelle nanoscopique.

ABSTRACT. Since 1857, the second law of thermodynamics has faced the challenge of Maxwell's imagined demon. The widely accepted response to this challenge suggests that the demon requires a bit of information to work, and according to Landauer's principle, the erasure of this bit must offset the entropy reduction achieved by the demon. Recent experiments involving two-state physical systems subject to thermal fluctuations at the nanoscale have aimed to either prove Landauer's principle or to demonstrate Szilard engines or Maxwell's demons in practice. We wrote the equations and developed a numerical model to simulate the evolution of these systems. The results highlight the distinction between thermodynamic entropy and information entropy. They demonstrate that Landauer's principle has a limited range of applicability and that, using a two-state memory, it is possible to eliminate a small amount of entropy without expending energy—challenging the second law of thermodynamics at the nanoscale.

MOTS-CLÉS. entropie, information, principe de Landauer, démon de Maxwell, second principe de la thermodynamique, machine de Szilard.

KEYWORDS. entropy, information, Landauer's principle, Maxwell's demon, second law of thermodynamics, Szilard engine.

1. Introduction

Ludwig Boltzmann a formulé en 1877 la version statistique du second principe de la thermodynamique, par l'équation $H = k_B \log W$, où H est l'entropie d'un système à l'équilibre, W son poids statistique et $k_B = 1,38 \times 10^{-23}$ J/K. Quelques années auparavant, James Clerk Maxwell avait développé la théorie cinétique des gaz et imaginé un démon capable de violer le second principe de la thermodynamique [1]. En 1929, Leo Szilard [2] proposa une expérience de pensée basée sur une machine capable de réduire l'entropie d'une molécule unique, sans dépense d'énergie, par la détection de sa position. Selon John von Neumann [3], c'est la connaissance de la position de la molécule qui permet à un opérateur de réaliser cette réduction d'entropie – une hypothèse qui préserve la validité du second principe en établissant un lien entre information et entropie. En 1962, Rolf Landauer [4], s'appuyant sur la formule de Boltzmann, a affirmé que l'effacement d'un bit d'information produit de manière irréversible une entropie d'au moins $k_B \log 2$ — un principe aujourd'hui largement accepté.

Des violations transitoires du second principe de la thermodynamique ont été observées dans de petits systèmes hors équilibre, et il a été démontré qu'elles se conforment aux théorèmes des fluctuations [5].

Ces violations apparentes disparaissent lorsque les résultats sont moyennés sur un grand nombre d'expériences.

Plus récemment, depuis les années 2010, de nombreuses expériences ont été menées à des niveaux d'énergie très faibles, de l'ordre de $k_B T$ à la température T , pour démontrer le principe de Landauer, pour implémenter une machine de Szilard ou un démon de Maxwell, ou encore pour explorer la thermodynamique de systèmes physiques à deux états, assimilables à des mémoires à un bit. Ces systèmes se répartissent en deux catégories : les mémoires bistables [6-11] caractérisées par un profil d'énergie à deux minima, et les mémoires à bascule [12-13], qui fonctionnent comme des systèmes tout-ou-rien. Dans les deux cas, un actionneur permet de modifier l'énergie potentielle du système. La stabilité de ces mémoires est limitée par les fluctuations thermodynamiques ou par un effet tunnel quantique, qui induisent des transitions aléatoires entre les deux états.

Dans un premier article [14], nous avons proposé une approche exploratoire de plusieurs expériences, ainsi qu'un bref aperçu historique du lien entre information et entropie. Dans un second article [15], nous avons formulé les équations régissant les évolutions quasi-statique et hors équilibre de ces systèmes, en supposant connue la fréquence de transition en fonction de la différence de potentiel entre les deux états. Nous proposons une explication des violations apparentes du second principe par une hypothèse sur la temporalité de l'entropie formulée par Landau et Lifshitz .

Dans le présent article nous généralisons l'approche précédente et nous analysons plusieurs expériences récentes par deux méthodes différentes. Dans la première approche nous calculons l'évolution hors équilibre des mémoires bistables à l'aide de l'équation de Langevin. Dans la seconde nous obtenons directement les équations de l'évolution quasi-statique des mémoires bistables et des mémoires à bascule, à partir de formules classiques de Boltzmann et de Gibbs. Notre analyse montre que l'entropie thermodynamique et l'entropie d'information d'un système ne sont pas toujours identiques et ne peuvent donc être considérées comme équivalentes. La limite de Landauer apparaît dans les processus hors équilibre, mais elle peut être contournée en appliquant des régimes quasi-statiques. Nous avons examiné les arguments utilisés par Landauer pour étayer son principe et avons identifié un argument discutable dans son raisonnement. Enfin, en analysant plusieurs expériences ayant implémenté une machine de Szilard ou un démon de Maxwell, nous montrons qu'elles mettent en évidence une limitation du second principe de la thermodynamique à l'échelle nanoscopique.

Dans la suite nous utilisons k_B comme unité d'entropie et $k_B T$ comme unité d'énergie, sauf indication contraire.

2. Opération de reset à zéro d'une mémoire bistable

Dans son article de 1961, Landauer [4] faisait principalement référence à une mémoire bistable définie par un profil d'énergie à deux puits de potentiel séparés par une barrière qui en assure la stabilité (figure 1, phase 1, et figure 7 à $t = 0$ en Annexe A1). Ce type de mémoire a été réalisé, par exemple, par Bérut et al. [6] et Jun et al. [8], avec une particule colloïdale en suspension dans un liquide, soumise à un profil de potentiel créé par une pince optique dans la première étude et par un champ électrique dans la seconde. Le mouvement de la particule dépend de quatre facteurs : le mouvement brownien, le frottement visqueux, le gradient de potentiel et sa variation temporelle.

Les travaux de Jun et al. ont permis d'obtenir des résultats d'une grande précision. Nous avons appliqué un modèle numérique basé sur l'équation de Langevin pour simuler l'évolution hors équilibre de leur système. Le potentiel $U(x,t)$ appliqué à la particule est déterministe, mais le mouvement brownien provoque un comportement stochastique. Nous avons calculé les valeurs moyennes des variables sur un grand nombre d'expériences, notamment de l'énergie de la particule $U_s(t)$, de l'entropie $S(t)$ et de la probabilité $P(t)$ de l'état 1. Le travail W fourni par l'actionneur et la chaleur Q fournie par le thermostat sont obtenus à partir des variations de U_s et S , ces deux quantités étant définies à une constante près. Les résultats de la simulation reproduisent les résultats expérimentaux avec une grande précision.

Nous avons développé une seconde approche, à partir de la formule d'entropie statistique de Gibbs, qui donne les équations régissant toute évolution quasi-statique du système, ce qui nous permet d'obtenir directement en fonction de t la valeur moyenne des variables pour un grand nombre d'expériences. Les deux voies sont décrites en détail en annexes A1 et A2.

Ces modèles reproduisent avec une grande précision l'évolution temporelle des variables tant pour les processus quasi-statiques que pour les processus hors équilibre. Ils confirment les résultats des expériences de Jun et al.[8]. Toutefois, nous ne partageons pas leur interprétation des résultats, comme nous le verrons ci-dessous.

Dans leur expérience la plage de potentiel est très étendue (de 13 à -40). Les calculs correspondants sont reportés en annexes A1 et A2. Nous proposons d'appliquer les équations à un protocole plus simple où le potentiel varie entre 0 et 13 et selon trois phases au lieu de quatre. Cette approche donne des résultats plus simples à observer et à interpréter. Les deux méthodes ont été appliquées à ce protocole simplifié (figure 1). Le reset à zéro s'effectue en trois phases de durée égale. Avec une durée totale de 1200 s, nous obtenons le même résultat que l'expérience de Jun et al. pour une durée de 940 s. Le profil de potentiel initial est un double puits parabolique. En phase 1, la barrière est abaissée symétriquement pour créer un puits unique à fond plat. Ce puits plat évolue ensuite en un puits parabolique par déplacement du bord droit vers la gauche et création progressive d'un palier à droite. Enfin, le palier situé à droite est abaissé pour se transformer en un puits parabolique, ramenant le système à son profil initial de double puits symétrique.

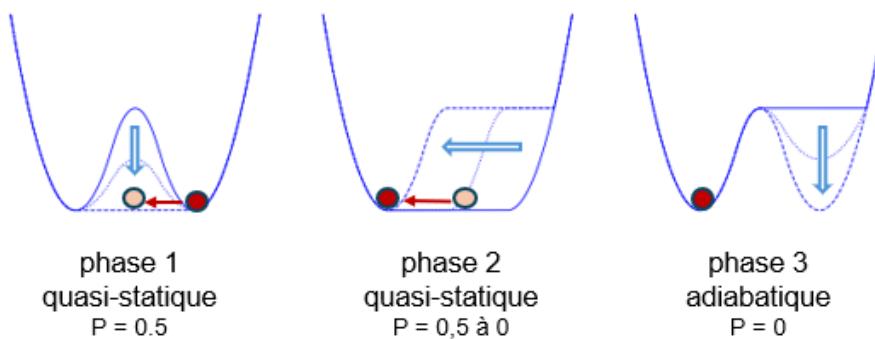


Figure 1. Reset à zéro d'une mémoire bistable

Au début de la phase 1, l'état de la mémoire est initialisé aléatoirement à 0 ou 1 (la particule se trouve dans le puits de gauche ou de droite). Sur la figure, l'état initial est 1. Durant la phase 1, la barrière est abaissée pour créer un fond plat, permettant à la particule de se déplacer librement dans un seul puits. Lors de la phase 2, le bord droit du puits plat est déplacé vers la gauche, confinant progressivement la particule vers la gauche. Enfin, lors de la phase 3, le puits de droite est rétabli tandis que la particule reste confinée dans le puits de gauche.

La figure 2 illustre l'évolution des variables au cours de l'opération. Le travail final fourni par l'actionneur est $W = 0,71$, ce qui correspond au résultat de l'expérience de Jun et al., compatible avec la limite de Landauer ($\log 2 = 0,693$). Les valeurs de la probabilité P de l'état 1, de la chaleur Q et du travail W sont présentées, d'une part pour la simulation stochastique (indice *sim*) par un calcul par différences finies à partir de l'équation de Langevin, d'autre part pour le processus quasi-statique (indice *qs*) par calcul numérique appliqué aux équations d'évolution (détails en annexes A1 et A2). Pour les deux premières phases, les courbes se superposent parfaitement, aux fluctuations près pour P et Q . À la limite quasi-statique, l'actionneur reçoit un travail $W = -1,130$ lors de l'abaissement de la barrière, mais fournit un travail $W = 1,823$ pour confiner la particule dans le puits de gauche, ce qui donne un travail total $W = \log 2$.

Dans la simulation, si la troisième phase est aussi brève que les deux premières, aucun échange de chaleur ou de travail n'est visible. Le processus est quasi adiabatique et le travail effectué lors des deux premières phases n'est pas récupéré. Il est dissipé, ce qui semble confirmer le principe de Landauer. Cependant, si l'on accorde suffisamment de temps à la troisième phase, celle-ci peut devenir quasi-statique. Comme calculé en annexe A2, cette durée est ici d'environ 1 an. La différence entre le processus adiabatique et le processus quasi-statique apparaît clairement sur la figure 2, à la fin de la phase 3.

Dans ce cas, le travail W est récupéré, le processus devient réversible et le reset à zéro n'est pas dissipatif, ce qui contredit le principe de Landauer.

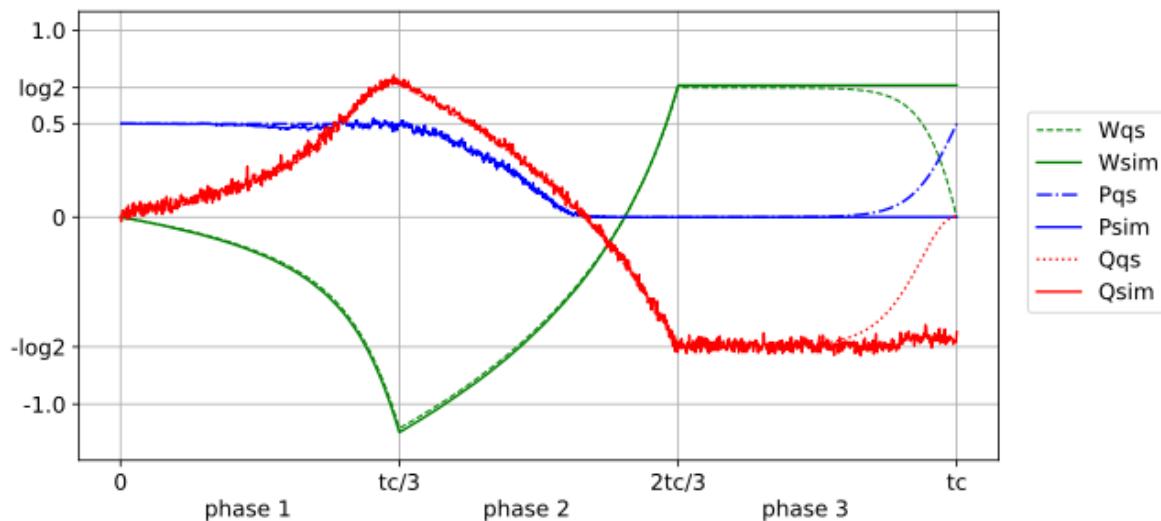


Figure 2. Évolution des variables lors de l'opération de reset à zéro

(*sim* = simulation de l'expérience pour $tc = 1200$ s, *qs* = limite quasi-statique) Durant la phase 1, la probabilité P reste constante à $P = 0,5$. La mémoire reçoit la chaleur $Q \approx 0,71$ du thermostat et transfère à l'actionneur le travail $W \approx -1,13$. Lors de la phase 2, le travail W augmente jusqu'à $\log 2$, tandis que la chaleur Q diminue jusqu'à $-\log 2$. Durant la phase 3, la simulation ne montre aucun changement, ce qui indique un processus adiabatique. Cependant, si le processus est quasi-statique, ce qui nécessite un temps extrêmement long (l'échelle de temps de la figure se s'applique pas dans ce cas), le travail W est entièrement récupéré, rendant l'opération réversible.

3. Différence entre l'information et l'entropie thermodynamique

Claude Shannon [17] a défini l'entropie d'information d'une mémoire à un bit par : $H = -(P \log P + (1 - P) \log (1 - P))$ où P est la probabilité de l'un ou l'autre état.

Reprendons l'expérience ci-dessus, en processus quasi-statique, et comparons la valeur de H ainsi calculée à l'entropie statistique S définie par la formule de Gibbs :

$S = -\sum_i P_i \log P_i$ où P_i est la probabilité que la particule se trouve à l'abscisse x_i à l'équilibre (voir annexe A2).

Nous observons que H et S sont égales au début et à la fin du processus, mais qu'elles s'écartent en cours de processus (figure 3). Dans la phase 1, la probabilité de l'état 1 reste $P = 0,5$, soit $H = \log 2$. En revanche, à mesure que la barrière s'abaisse, l'espace des phases de la mémoire augmente, ce qui entraîne une augmentation de S jusqu'à 1,403 à la fin de cette phase.

Ce résultat remet en cause l'équivalence communément admise entre l'entropie thermodynamique et l'entropie de Shannon. De plus, dans le cas d'une mémoire bistable, le choix de la frontière x entre les états 0 et 1 est conventionnel. Pour un double puits symétrique, cette frontière est généralement placée

sur l'axe de symétrie, mais rien ne s'oppose à ce que l'on modifie la position de cette frontière, ce qui change l'entropie de Shannon, tout en laissant inchangée l'entropie thermodynamique.

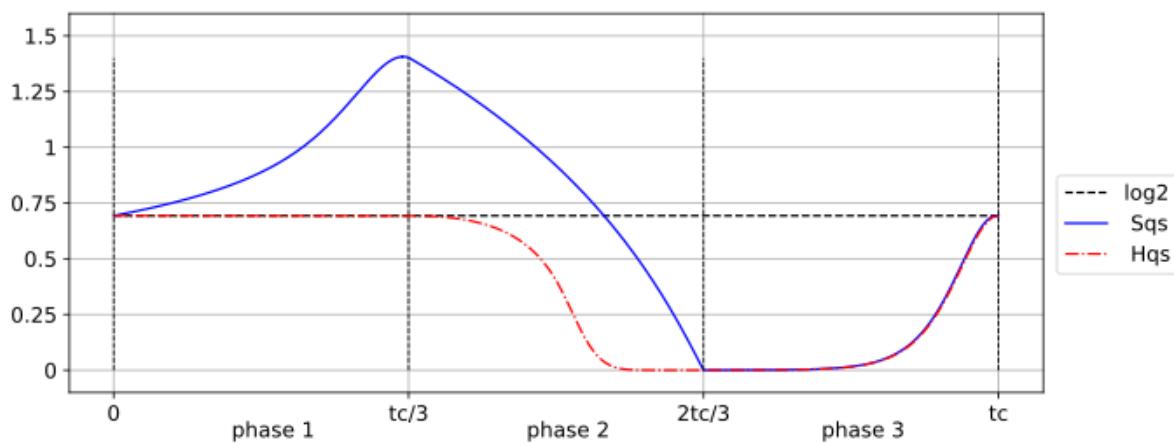


Figure 3. Entropie statistique S et entropie d'information H à la limite quasi-statique

Au début de la phase 1 on a $S = H = \log 2$. Ensuite l'état de la mémoire reste aléatoire ($H = \log 2$), tandis que l'entropie statistique augmente jusqu'à à $S = 1.403$ à mesure que l'espace des phases s'étend. En phase 2, lorsque la mémoire est forcée à l'état 0, les deux entropies diminuent jusqu'à 0. En phase 3 elles remontent vers leur valeur initiale en restant égales.

Si ces deux entropies ne sont pas équivalentes, il convient de reconsidérer les arguments utilisés par Landauer pour établir son principe. Il affirme [4] que pour un bit, un « état initial bien défini correspond, selon la définition statistique usuelle de l'entropie $S = k_B \log W$ à une entropie nulle ». Il explique ensuite : « Les degrés de liberté associés à l'information peuvent, par relaxation thermique, évoluer vers n'importe lequel des 2^N états possibles (pour un ensemble de N bits), et l'entropie peut donc augmenter de $k_B N \log 2$ à mesure que l'information initiale est thermalisée ». Il ajoute que le « reset à un » des N bits thermalisés entraîne une diminution d'entropie de $k_B N \log 2$ et conclut que « l'entropie d'un système fermé ne peut diminuer ; par conséquent, cette entropie doit apparaître ailleurs sous la forme de dissipation thermique ». La formulation la plus courante de son principe, équivalente à la formulation originale, affirme que l'effacement d'un bit provoque une dissipation d'énergie d'au moins $k_B T \log 2$.

Landauer applique la formule de Boltzmann $S = k_B \log W$ à une mémoire dans un « état bien défini », c'est-à-dire 0 ou 1, ce qui donne $S = 0$. Cependant, il constate qu'après relaxation thermique, l'entropie peut augmenter à $S = k_B \log 2$, reconnaissant ainsi que l'état initial n'était pas à l'équilibre. La limite de son approche réside dans l'application de la formule de Boltzmann à un état « bien défini » d'une mémoire bistable, qui est intrinsèquement hors équilibre. Or la formule de Boltzmann ne s'applique qu'à un système à l'équilibre. S'il s'agit d'un système macroscopique, celui-ci est soumis à des fluctuations dont la moyenne temporelle est nulle. S'il s'agit, comme dans le cas présent, d'un système nanoscopique, la formule donne l'entropie moyenne sur un très grand nombre d'expériences, où, de manière équivalente, sur un temps très long par rapport au temps de relaxation du système, qui est de l'ordre d'une année dans le cas présent (voir annexe A2).

Finalement, l'expérience de Jun et al. ne prouve pas le principe de Landauer. Comme dans notre simulation, si la durée de la phase finale est suffisamment longue pour que le processus devienne quasi-statique, l'ensemble du processus devient réversible et le travail $W = \log 2$ dépensé lors des phases précédentes peut être récupéré. Par conséquent, cette dissipation, souvent citée comme preuve du principe de Landauer, n'apparaît que lorsque la dernière phase est adiabatique et elle peut être évitée si cette phase est suffisamment longue pour être quasi-statique.

4. Mémoire à décalage et reset à zéro énergétiquement neutre

En réutilisant le dispositif employé pour la mémoire bistable — une particule colloïdale en suspension dans un fluide —, nous pouvons concevoir un autre type de mémoire où l'entropie d'information est contrôlée et stable, sans nécessiter de barrière de potentiel. L'idée repose sur le protocole à énergie nulle introduit par Gammaitoni [16], avec un puits de potentiel unique, que nous proposons d'appeler *mémoire à décalage* (shift memory).

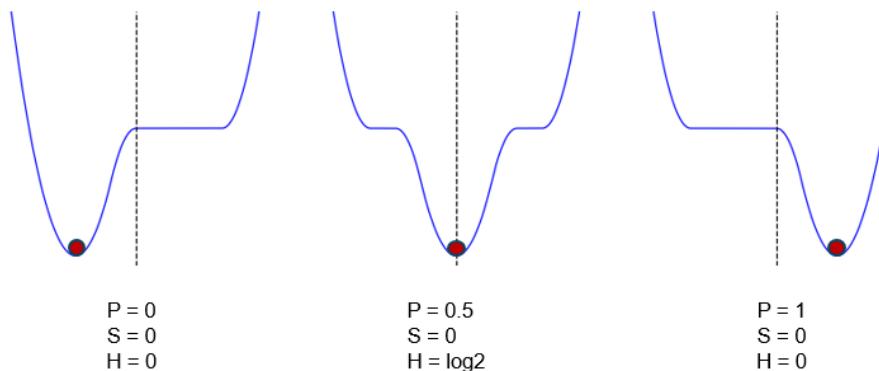


Figure 4 – Opération NOT de la mémoire à décalage

Le puits de potentiel se déplace progressivement de gauche à droite. Les paramètres physiques de la mémoire (énergie U_s , entropie S) restent constants. En processus quasi-statique aucun travail ni chaleur n'est échangé, la probabilité de l'état 1 passe de 0 à 1 et l'entropie d'information H varie de 0 à $\log 2$ puis revient à 0. L'opération est énergétiquement neutre.

Le puits unique peut être déplacé d'un côté à l'autre pour inverser l'état de la mémoire (opération NOT, figure 4). Effectuée de manière quasi-statique, cette opération est énergétiquement neutre. Dans ce processus, l'entropie thermodynamique reste constante, tandis que l'entropie d'information varie entre 0 et $\log 2$.

Pour la mémoire à décalage, le reset à zéro est également énergétiquement neutre. Si l'état initial est 0, aucune action n'est requise. Si l'état initial est 1, il peut être inversé sans dépense d'énergie. On peut objecter que la position initiale de la particule doit être connue pour appliquer le protocole, et que cette information doit être stockée quelque part puis effacée après l'opération. Mais puisque cette information est déjà contenue dans la mémoire elle-même il n'est pas nécessaire de la copier et de la stocker ailleurs. Par conséquent, ce type de mémoire remet directement en question le principe de Landauer.

5. Mémoire à bascule et machine de Szilard

Une mémoire à bascule est un système physique à deux états, séparés par une différence de potentiel contrôlée $U(t)$. Nous nous référons à deux séries d'expériences portant sur ce type de mémoire. Les expériences de Koski et al. [12] visant à réaliser une machine de Szilard, utilisent une boîte à un seul électron. Une différence de potentiel électrique appliquée entre deux îlots métalliques agit sur la probabilité de présence (état 1) ou d'absence (état 0) d'un électron dans une région intermédiaire constituant la boîte. Les équations décrivant l'évolution quasi-statique de ce système sont reportées en annexe A3.

Les expériences de Ribetti et al. [13] conçues pour réaliser un démon de Maxwell, utilisent un fragment d'ADN en épingle à cheveux, dont les deux branches sont liées par des liaisons hydrogène au repos (état 1) et peuvent être séparées en tirant sur leurs extrémités (état 0). Un actionneur ajuste le potentiel électrique dans le premier cas, et la force de traction exercée sur la molécule dans le second cas, afin d'appliquer une différence de potentiel $U(t)$ entre les deux états.

Dans ce cas, contrairement à la mémoire bistable, la frontière entre les états 0 et 1 de la mémoire à un bit n'est pas défini par un paramètre conventionnel, il y a correspondance logique entre état physique et information, et nous observerons que l'entropie thermodynamique et l'entropie de Shannon restent égales dans ce système.

Koski et al. [12] et Ribezzi et al. [13] ont utilisé des mémoires à bascule pour construire une machine de Szilard, comme illustré sur la figure 5. Le profil énergétique se compose de deux paliers, avec un potentiel de référence zéro à gauche et un potentiel contrôlé U à droite, qui peut être positif pour obtenir l'état 0 ou négatif pour l'état 1.

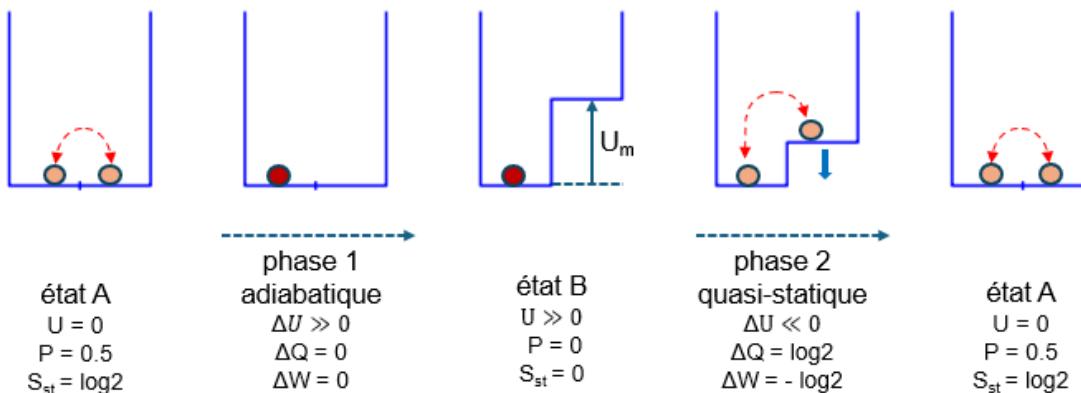


Figure 5. Une machine de Szilard

Dans l'état A, la mémoire est aléatoirement à l'état 0 ou 1. Lorsqu'un état 0 est détecté, U est brusquement porté à une valeur élevée U_m (phase 1), stabilisant le bit à 0. L'entropie statistique S_{st} diminue de $\log 2$ à 0. Dans la phase 2, U est progressivement ramené à 0, revenant à l'état initial. Durant cette phase, la chaleur $Q = \log 2$ est convertie en travail¹.

Initialement $U = 0$ et l'état de la mémoire est aléatoirement 0 ou 1 avec la probabilité $P = 0,5$. La première phase débute lorsque la mémoire est à l'état 0, après une attente aussi longue que nécessaire. Le potentiel U est alors brusquement porté à une valeur $U_m \gg 0$, assurant ainsi la stabilisation de l'état 0 ($P \simeq 0$). Ce processus est adiabatique ($\Delta Q = 0$) et énergétiquement neutre ($\Delta U_s = \Delta W = 0$). Cependant, l'entropie statistique du système est désormais $S_{st} = 0$. Elle a diminué de $\Delta S_{st} = -\log 2$.

Dans la phase 2, le potentiel U est progressivement réduit à 0 et l'entropie S_{st} revient à 0. Le bilan énergétique de cette phase est donné par $\Delta U_s = 0$ et $\Delta S = \Delta Q = \log 2$ ², d'où l'on obtient $\Delta W = -\log 2$, ce qui signifie qu'une quantité de chaleur $Q = \log 2$ a été extraite du thermostat, convertie en travail et transférée à l'actionneur. Ces réalisations d'une machine de Szilard démontrent qu'il est possible de convertir une quantité de chaleur $Q = \log 2$ en une quantité équivalente de travail, réduisant ainsi l'entropie d'un système isolé, ce qui contredit le second principe de la thermodynamique.

Les auteurs de ces études proposent une interprétation qui permet d'expliquer la diminution d'entropie sans enfreindre le second principe de la thermodynamique. Cette interprétation stipule que l'information selon laquelle la mémoire est à l'état 0, au début du cycle, doit être stockée dans une mémoire externe, et qu'une quantité d'entropie $\Delta S = \log 2$ est produite lors de l'effacement de cette information, conformément au principe de Landauer. L'argument ne tient plus après la réfutation du principe de Landauer.

¹ La valeur $\log 2$ est une limite supérieure, qui peut être approchée dans les meilleures conditions d'expérience.

² L'égalité $\Delta S = \Delta Q$ provient du choix des unités (voir en fin d'introduction).

De plus, l'information servant à déclencher le cycle est contenue dans la mémoire elle-même ; il s'agit du bit correspondant à l'état 0. Par conséquent, il n'est pas nécessaire de la stocker ni de l'effacer dans une mémoire externe.

6. Mémoire à bascule et démon de Maxwell

Ribezzi et al. [13] ont réalisé un démon de Maxwell dont le fonctionnement est illustré par la figure 6. Initialement, le potentiel de la mémoire est $U_i > 0$ avec une probabilité $P_i < 0.5$ de l'état 1. La mémoire est généralement dans l'état 0, qui est le plus probable. Dès qu'une transition vers l'état 1 est détectée, le niveau d'énergie U est brusquement ramené à une valeur $U_m \ll 0$ pour stabiliser l'état 1, avec une probabilité $P_m \simeq 1$.

Lors de la phase 2, le potentiel est ramené de manière quasi-statique à sa valeur initiale U_i . L'expérience et la théorie (voir annexe A3, équation [13]) montrent que cette opération a pour résultat la transformation de chaleur en travail $\Delta W = \log(1 + \exp(U_i))$, dont la valeur est théoriquement illimitée. Cependant plus cette valeur ΔW est élevée, plus le temps d'attente moyen de la phase 1 est long, celui-ci étant proportionnel à $\exp(U_i)$.

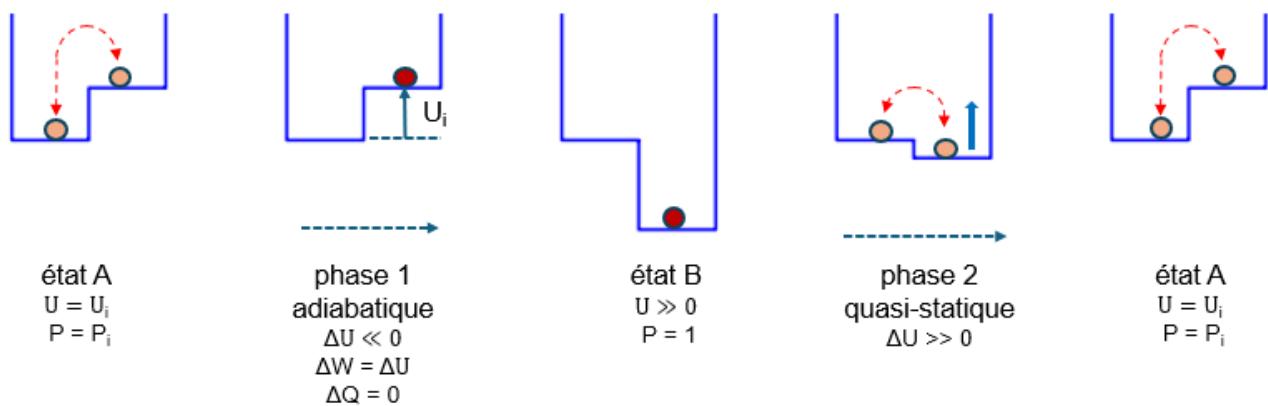


Figure 6. Un démon de Maxwell

Dans l'état A, l'état du système peut alterner entre 0 (le plus probable) et 1. Lorsque l'état 1 est détecté, le potentiel U est forcé à une valeur très basse (phase 1 de A à B). Ceci stabilise la mémoire dans l'état 1. Durant la phase 2, le potentiel U est ensuite progressivement ramené à sa valeur initiale U_i .

D'après Ribezzi et al., cette réduction d'entropie est compensée par l'effacement des informations nécessaires au fonctionnement du processus. Ces informations auraient été stockées sous forme d'un nombre croissant de bits pendant la durée d'attente de la première phase, puis effacées, dissipant ainsi de l'énergie conformément au principe de Landauer. Cependant, comme pour la machine de Szilard décrite précédemment, ces informations résident dans la mémoire elle-même, ce qui élimine le besoin d'une mémoire externe pour leur stockage. Elles n'ont donc pas à être effacées.

Il convient de noter cependant que la réduction d'entropie locale obtenue au sein du système est loin d'être exploitable en pratique. En effet, la mémoire fait partie d'un dispositif expérimental pouvant inclure une pince optique avec son faisceau laser, ou un système de refroidissement et d'autres équipements auxiliaires. Dans les expériences de ce type réalisées à ce jour, ce dispositif génère beaucoup plus d'entropie qu'il n'en élimine. Néanmoins, il reste vrai que le second principe de la thermodynamique peut être localement violé à des niveaux d'énergie de l'ordre de $k_B T$ (c'est-à-dire $4,14 \cdot 10^{-21} \text{ J}$ à 300 K).

7. Entropie statistique et entropie thermodynamique

Ces deux expériences – la machine de Szilard et le démon de Maxwell – mettent en évidence des exceptions au second principe de la thermodynamique. Elles révèlent également une distinction entre l'entropie thermodynamique S_{th} et l'entropie statistique S_{st} . Par exemple, dans l'état A de la figure 6, le profil énergétique reste inchangé, donc l'entropie statistique S_{st} demeure constante, alors que chaque transition de la mémoire entre l'état 0 et l'état 1 implique un échange de chaleur et d'entropie thermodynamique, $\Delta Q = \Delta S_{th} = \pm U_i$ entre la mémoire et le thermostat. De ce fait, les entropies S_{th} et S_{st} de la mémoire présentent des différences transitoires.

On peut noter qu'à l'origine l'entropie statistique introduite par Boltzmann concernait des systèmes macroscopiques comportant un très grand nombre d'atomes ou de molécules, et à l'équilibre. Dans le cas présent nous considérons un système à 2 états qui ne peut pas être considéré en général à l'équilibre puisqu'il est soumis à des transitions stochastiques entre les deux états. Pour revenir aux notions d'équilibre et de statistique il faut réaliser un grand nombre d'expériences et en considérer la moyenne des résultats.

8. Conclusion

Depuis les travaux de Maxwell et de Szilard la question du caractère absolu du second principe de la thermodynamique a longtemps été hors de portée de l'expérimentation à l'échelle nanoscopique. Plusieurs expériences récentes sur des machines de Szilard et des démons de Maxwell ont produit des résultats suffisamment précis qui nous ont permis de mettre évidence des violations locales, minimes mais reproductibles, du second principe, même si les dispositifs expérimentaux nécessaires à leur mise en œuvre génèrent actuellement beaucoup plus d'entropie qu'ils ne peuvent en éliminer.

Nous avons également démontré que le principe d'équivalence entre l'entropie thermodynamique et l'entropie d'information de Shannon doit être abandonné. Shannon [17] a défini son entropie $H = -(P_0 \log P_0 + P_1 \log P_1)$ comme la seule fonction mathématique satisfaisant trois contraintes bien définies, qu'il a rencontrées lors de la résolution de problèmes cryptographiques pendant la Seconde Guerre mondiale [18]. À partir des travaux de Hartley [19], Shannon a établi sa formule, où H représente la quantité minimale d'information requise pour coder un message donné. Sa valeur dépend de statistiques de fréquence dans un contexte spécifique. Elle est donc relative à ce contexte, contrairement à la formule de Gibbs qui s'applique à un système physique bien défini. Bien que les deux concepts soient analogues, ils s'appliquent à des domaines différents.

La formule de Shannon est couramment utilisée pour la transmission et le stockage de l'information. Il a été rapporté [20] que von Neumann a suggéré à Shannon le mot *entropie* pour sa mesure statistique de l'information, ce qui a contribué à l'idée largement acceptée qu'il existe une équivalence entre l'entropie thermodynamique et l'entropie d'information [21]. Les expériences étudiées ci-dessus montrent que ce n'est pas le cas. De plus, elles diffèrent par leur nature. L'entropie thermodynamique est une caractéristique intrinsèque d'un système physique, alors que l'entropie d'information repose généralement sur un code et dépend de statistiques d'utilisation de ce code dans un contexte donné [22].

Disponibilité des données

Les scripts et documents associés à cette étude sont disponibles dans le dépôt GitHub suivant : https://github.com/argou/limits_of_landauer_and_second_law

Remerciements

L'auteur remercie les deux relecteurs pour leurs observations et suggestions constructives, qui ont permis de clarifier plusieurs points du manuscrit.

Bibliographie

- [1] H. Leff et A. Rex, *Maxwell's Demon 2: Entropy, Classical and Quantum Information, Computing*, Institute of Physics. London: Institute of Physics, 2003.
- [2] L. Szilard, « On the decrease of entropy in a thermodynamic system by the intervention of intelligent beings », *Syst. Res.*, vol. 9, n° 4, p. 301-310, 1929.
- [3] J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*. Princeton University Press, 1932.
- [4] R. Landauer, « Irreversibility and heat generation in the computing process », *IBM J. Res. Dev.*, vol. 5, n° 3, p. 183-191, juill. 1961, doi: 10.1147/rd.53.0183.
- [5] F. Ritort, « Work fluctuations, transient violations of the second law and free-energy recovery methods: Perspectives in Theory and Experiments », Birkhauser Verlag, Basel, 2003., Poincaré Seminar 2 (2003) 195 – 229. doi: 10.1007/978-3-0348-7932-3_9.
- [6] A. Bérut, A. Arakelyan, A. Petrosyan, S. Ciliberto, R. Dillenschneider, et E. Lutz, « Experimental verification of Landauer's principle linking information and thermodynamics », *Nature*, vol. 483, n° 7388, p. 187-189, mars 2012.
- [7] A. O. Orlov, C. S. Lent, C. C. Thorpe, G. P. Boehler, et G. L. Snider, « Experimental test of Landauer's principle at the sub-kbT level », *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 51, p. 06FE10, juin 2012, doi: 10.1143/JJAP.51.06FE10.
- [8] Y. Jun, M. Gavrilov, et J. Bechhoefer, « High-precision test of Landauer's principle in a feedback trap », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, n° 19, p. 190601, 2014.
- [9] J. Hong, B. Lambson, S. Dhuey, et J. Bokor, « Experimental test of Landauer's principle in single-bit operations on nanomagnetic memory bits », *Sci. Adv.*, mars 2016.
- [10] R. Gaudenzi, E. Burzurí, S. Maegawa, H. S. J. van der Zant, et F. Luis, « Quantum-enhanced Landauer erasure and storage of molecular magnetic bit », *13th International Workshop on Magnetism and Superconductivity at the Nanoscale*, 2017, Consulté le: 21 mars 2025. [En ligne]. Disponible sur: <https://digital.csic.es/handle/10261/183593>
- [11] S. Dago, J. Pereda, N. Barros, S. Ciliberto, et L. Bellon, « Information and thermodynamics: fast and precise approach to Landauer's bound in an underdamped micromechanical oscillator », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 126, avr. 2021.
- [12] J. V. Koski, V. F. Maisi, J. P. Pekola, et D. V. Averin, « Experimental realization of a Szilard engine with a single electron », *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, vol. 111, n° 38, p. 13786-13789, sept. 2014.
- [13] M. Ribezzi-Crivellari et F. Ritort, « Large work extraction and the Landauer limit in a continuous Maxwell demon », *Nat. Phys.*, vol. 15, n° 7, p. 660-664, juill. 2019.
- [14] J. Argouarc'h, « Information-entropy equivalence, Maxwell's demon and the information paradox », <https://www.openscience.fr>, déc. 2021.
- [15] J. Argouarc'h, « Paradox of entropy: a bit of Information without energy », <https://www.openscience.fr>. Consulté le: 25 septembre 2024. [En ligne]. Disponible sur: <https://www.openscience.fr/Paradox-of-entropy-a-bit-of-Information-without-energy>
- [16] L. Gammaitoni, *The Physics of Computing*. Springer International Publishing, 2021. doi: 10.1007/978-3-030-87108-6.
- [17] C. Shannon, « A mathematical theory of communication », *Bell Syst. Tech. J.*, vol. 27, n° 3, p. 379-423, 1948.
- [18] C. Shannon, « A Mathematical Theory of Cryptography », Alcatel-Lucent, Technical memorandum, 1945. Consulté le: 17 septembre 2021. [En ligne]. Disponible sur: <https://www.iacr.org/museum/shannon45.html>
- [19] R. Hartley, « Transmission of information », *Bell Syst. Tech. J.*, vol. 7, n° 3, p. 535-563, 1928.
- [20] M. Tribus, « Energy and information », *Sci. Am.*, 1971.
- [21] L. Brillouin, *La science et la théorie de l'information*, Jacques Gabay. 1959.
- [22] J. Argouarc'h, *Archéologie du signe : Théorie unifiée de l'information et de la connaissance*. L'Harmattan, 2020.
- [23] G. Volpe et G. Volpe, « Simulation of a Brownian particle in an optical trap », *American Journal of Physics*, vol. 81, n° 3, p. 224-230, mars 2013, doi: 10.1119/1.4772632.
- [24] K. Sekimoto, *Stochastic energetics*. Springer, 2010. Consulté le: 5 avril 2022. [En ligne]. Disponible sur: https://catalog.library.vanderbilt.edu/discovery/fulldisplay/alma991034565569703276/01VAN_INST:vanui

A1 Simulation d'une mémoire bistable par des équations aux différences finies

Dans l'expérience de Jun et al. [8], une particule en suspension dans un milieu aqueux est soumise à un potentiel virtuel $U(x,t)$ piloté à une fréquence de 100 Hz (soit une période $\Delta t = 0.01 s$).

Au cours d'une période, la particule est soumise à une force due au gradient de potentiel $F = - \frac{\partial U(x,t)}{\partial x}$ et à un mouvement brownien stochastique. Le mouvement de la particule est régi par l'équation de Langevin, à l'exclusion du terme d'inertie qui peut être négligé³ :

$$\frac{\Delta x}{\Delta t} = -\frac{1}{\gamma} \frac{\partial U}{\partial x} + \sqrt{\frac{2D}{\Delta t}} w,$$

où w est un bruit blanc de moyenne $\langle w(t) \rangle = 0$ et de variance $\langle w(t)^2 \rangle = 1$.

Le coefficient de frottement visqueux est $\gamma = 6 \pi \eta r$ avec $\eta = 0.89 \cdot 10^{-3} \text{Ns/m}^2$ pour l'eau, et le rayon de la particule est $r = 0.1 \mu\text{m}$. En utilisant la relation d'Einstein $D = \frac{k_B T}{\gamma}$, on obtient $D = 2.5 \mu\text{m}^2/\text{s}$.

Ainsi, le déplacement de la particule dû au gradient de potentiel et au mouvement brownien pendant Δt est :

$$\Delta x = \left(-D \frac{\partial U}{\partial x} + \sqrt{\frac{2D}{\Delta t}} w \right) \Delta t. \quad [1]$$

Lors de ce déplacement Δx le transfert de chaleur (positif ou négatif) du thermostat vers la particule est :

$$\Delta Q = U(x + \Delta x, t) - U(x, t). \quad [2]$$

Le profil de potentiel passe alors de $U(x + \Delta x, t)$ à $U(x + \Delta x, t + \Delta t)$.

La variation totale d'énergie de la particule, résultant du mouvement brownien, du gradient de potentiel et du travail de l'actionneur, est donnée par :

$$\Delta U = U(x + \Delta x, t + \Delta t) - U(x, t). \quad [3]$$

Ainsi, selon la loi de conservation de l'énergie, l'actionneur a fourni un travail :

$$\Delta W = \Delta U - \Delta Q. \quad [4]$$

À l'aide de ces équations aux différences finies, nous pouvons simuler numériquement l'évolution de la mémoire si nous connaissons l'état initial x_0 et la fonction $U(x,t)$. Pour tenir compte de la stochasticité du mouvement brownien, les variables doivent être moyennées sur un grand nombre d'essais.

Nous avons appliqué cette méthode à l'expérience de Jun et al. Le profil énergétique $U(x, t)$ est une fonction quartique⁴ de x , représentée sur la figure 7 en limites de phases. La position initiale de la particule est choisie aléatoirement au fond d'un des puits de potentiel gauche ou droit. Le profil U est

³ Selon Volpe et Volpe [23], le terme inertiel est négligeable si $\Delta t/\tau < 10$. Nous avons ici $\Delta t = 10 \text{ ms}$, et τ est le temps de relaxation de quantité de mouvement $\tau = m/\gamma$ soit le rapport de la masse sur le coefficient de frottement visqueux. On a ici $\Delta t/\tau = 40 \cdot 10^{-9}$.

⁴ On pourra se reporter au site https://github.com/argou/limits_of_lindauer_and_second_law où sont définies les fonctions $U(x,t)$ des 4 phases du processus.

laissé invariant pendant une période de 20 s pour simuler un état initial à l'équilibre.

Nous avons simulé $ns = 1440$ cycles de $t_0 = 0$ à $t_{nt} = tc$ (temps de cycle $tc = 940$ s). Ainsi, $nt = tc/\Delta t = 940\ 000$ pas de calcul.

Pour chaque simulation, nous calculons $x_{i,j}$, $Q_{i,j}$ et $U_{i,j}$ pour les indices $i = 0$ à nt , $j = 1$ à ns .

À partir de $x_{i,j}$, nous obtenons la probabilité moyenne de l'état 1 à l'instant t_i :

$$P_i = \frac{1}{ns} \sum_{j=1}^{ns} (0 \text{ if } x_{i,j} < 0; 1 \text{ si } x_{i,j} > 0),$$

$$\text{et les vecteurs : } Q_i = \frac{1}{ns} \sum_{j=1}^{ns} Q_{i,j} \quad \text{et} \quad U_i = \frac{1}{ns} \sum_{j=1}^{ns} U_{i,j}.$$

Avec nos unités, définies en introduction, l'entropie thermodynamique est telle que $\Delta S = \Delta Q$. Ainsi, si nous prenons pour référence $S_0 = \log 2$ (pour $P_0 = 0.5$), nous obtenons : $S_i = \log 2 + Q_i$

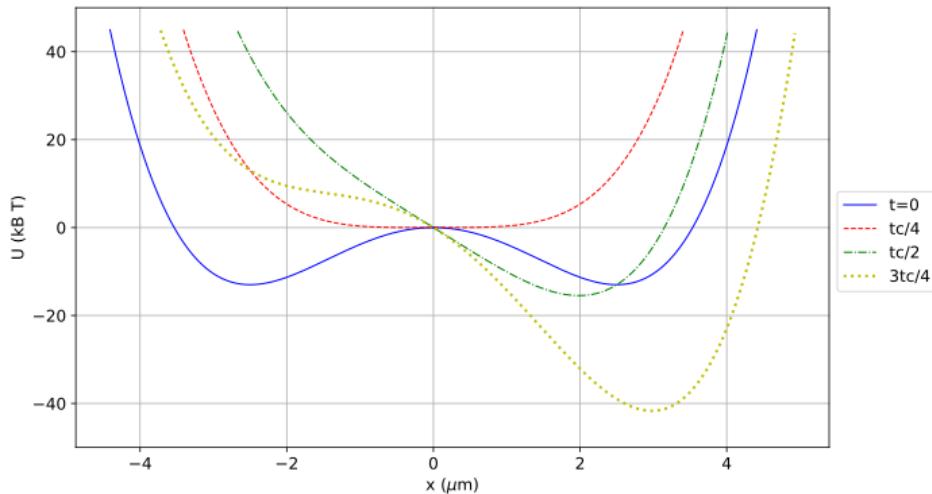


Figure 7. Profil de potentiel en limites de phase

A la fin de la phase 4 ($t = tc$) on revient au profil initial ($t = 0$)

L'expérience a été conçue pour valider le principe de Landauer. Le résultat final, tant de l'expérience que de la simulation, donne un travail $W = 0,71$, proche de la limite de Landauer $\log 2$. L'évolution des variables est illustrée sur les figures 8 et 9 (où elles sont comparées aux valeurs quasi-statiques calculées directement selon les équations ci-dessous).

A2 Équations quasi-statiques d'une mémoire bistable

La particule est confinée entre les abscisses x_{min} et x_{max} . L'intervalle $[x_{min}, x_{max}]$ est divisé en N segments égaux. Pour un processus quasi-statique, la probabilité que la particule se trouve à une abscisse x_i à l'instant t suit la loi de Boltzmann :

$$P_i(t) = \frac{1}{Z(t)} \exp(-U_i(t)) \quad \text{avec} \quad Z(t) = \sum_{i=1}^N \exp(-U_i(t)) \quad [5]$$

Dans ce qui suit nous omettons la variable t dont dépendent toutes les variables. L'énergie potentielle du système est $U_s = \sum_{i=1}^N P_i U_i$.

L'entropie statistique est donnée par la formule de Gibbs $S = -\sum_{i=1}^N P_i \log P_i$, [6]

$$\text{ainsi} \quad S = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^N U_i \exp(-U_i) + \frac{\log Z}{Z} \sum_{i=1}^N \exp(-U_i)$$

$$\text{soit} \quad S = U_s + \log Z. \quad [7]$$

La loi de conservation de l'énergie implique que $\Delta U_s = \Delta W + \Delta Q$. Compte tenu de notre choix d'unités, nous avons $\Delta Q = \Delta S$.

Donc, d'après [7] : $\Delta W = -\Delta(\log Z)$

[8]

Connaissant l'état initial et $U(x, t)$ nous pouvons calculer directement les valeurs numériques des variables pour un processus quasi-statique, qui sont représentées sur les figures 8 et 9. Ces valeurs calculées coïncident avec les résultats de la simulation, sauf à la fin de la phase 4, qui n'est pas réalisée de manière quasi-statique dans l'expérience.

La concordance entre ces deux méthodes obtenues indépendamment — et leur cohérence avec le résultat final de l'expérience de Jun et al. — conforte la validité des deux approches.

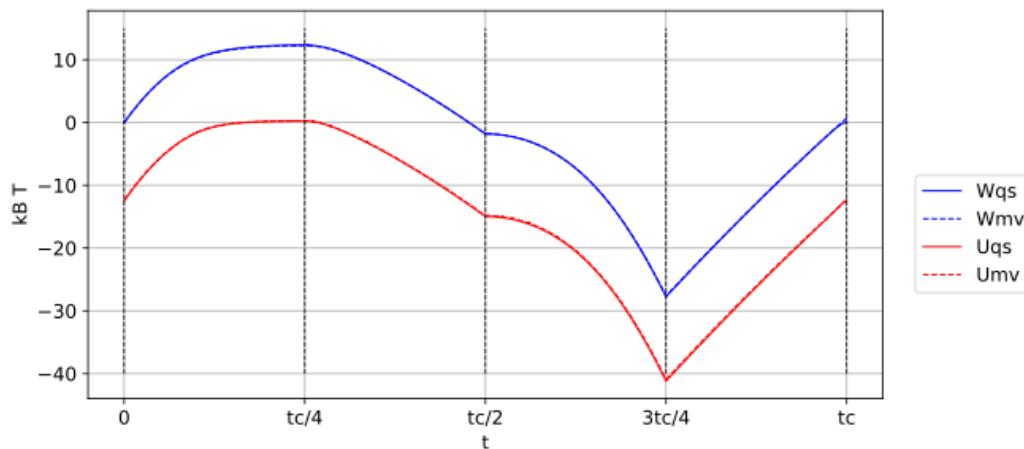


Figure 8. Évolution du travail W et du potentiel U de la particule

Les valeurs simulées de W et U correspondent parfaitement aux valeurs quasi-statiques (les variables sont stochastiques, mais les fluctuations ne sont pas visibles à cette échelle).

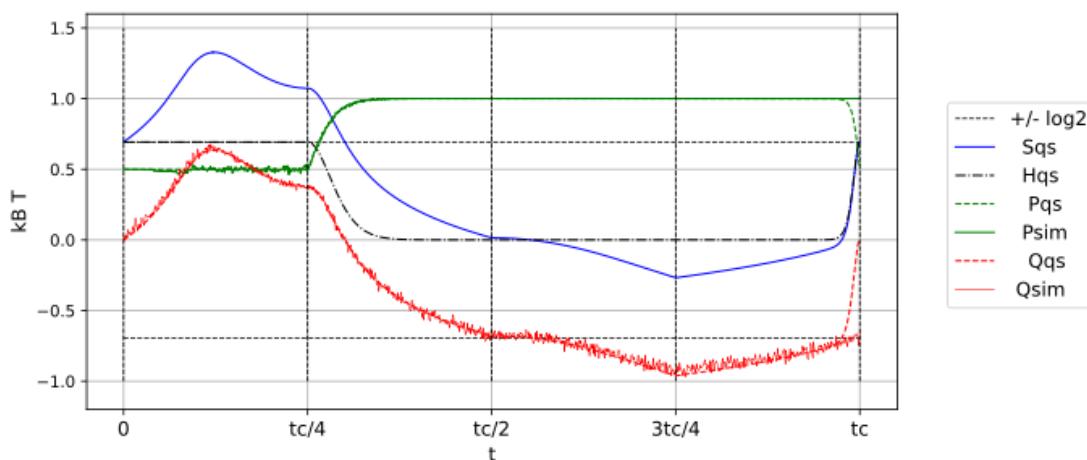


Figure 9. Évolution de P , Q , S et H

Les valeurs de simulation $Psim$ et $Qsim$ ne diffèrent des valeurs quasi-statiques Pqs et Qqs que par les fluctuations, sauf à la fin de la phase 4, qui se produit hors équilibre pour la simulation. Les entropies thermodynamique S et d'information H sont en général différentes.

Application à un protocole simplifié

Dans l'étude de Jun et al. [8], le potentiel peut varier entre 13 et -40 au cours du processus. Ces variations importantes rendent difficile la visualisation des valeurs des principaux paramètres pour la compréhension du processus.

Nous proposons un protocole simplifié, qui peut être réalisé avec le même équipement, avec une variation de potentiel entre 0 et 13 et une durée totale de 1200 s, divisée en trois phases égales au lieu de

940 s en quatre phases. Ce protocole donne les mêmes résultats finaux, en particulier la même valeur $W = 0,71$ (section 2), et est plus facile à interpréter. Il est présenté sur la figure 1, tandis que l'évolution des variables du système est montré en figures 2 et 3.

Le profil énergétique $U(x, t)$ est une fonction continûment différentiable composée de segments quadratiques de la forme $a x^2$, où $a = 10.8$ pour les puits, $a = 0$ pour les paliers et $a = \pm 54$ pour les jonctions intermédiaires, de sorte que les dérivées sont continues. Durant chaque phase, le potentiel $U(x, t)$ évolue par interpolation linéaire entre ses valeurs initiales $U(x, t_i)$ et finales $U(x, t_f)$.

La distance entre les deux minima est 4,8 μm , et le potentiel maximal de la barrière ou des paliers est $U = 13$. La frontière entre l'état 0 et l'état 1 est définie par l'axe de symétrie de la figure.

Evaluons quelle doit être la durée de la dernière phase pour qu'elle soit quasi-statique, de sorte que l'énergie $W = \log 2$ puisse être récupérée. A l'aide de la formule de Kramers nous pouvons estimer cette durée. La fréquence moyenne de transition d'un état à l'autre proposée par Jun et al.[8] est $F = f_0 \exp(\Delta U)$, où ΔU est la hauteur de la barrière à franchir et $f_0 = 2.0$ Hz. L'équation différentielle décrivant la probabilité de l'état 1 est :

$$dP/dt = F_{01} P - F_{10}(1 - P), \quad [9]$$

F_{ij} étant la fréquence de transition de l'état i vers l'état j (voir par exemple [24]). Dans notre cas $F_{01} = f_0 \exp(13)$. La formule de Kramers ne s'applique pas directement en début de processus, en l'absence de puits de potentiel dans la partie de droite. La formule de répartition de Boltzmann permet de calculer $F_{10}(t)$ pour résoudre le problème ⁵.

L'intégration numérique de l'équation [9] pour plusieurs durées de la dernière phase donne les résultats présentés sur la figure [10].

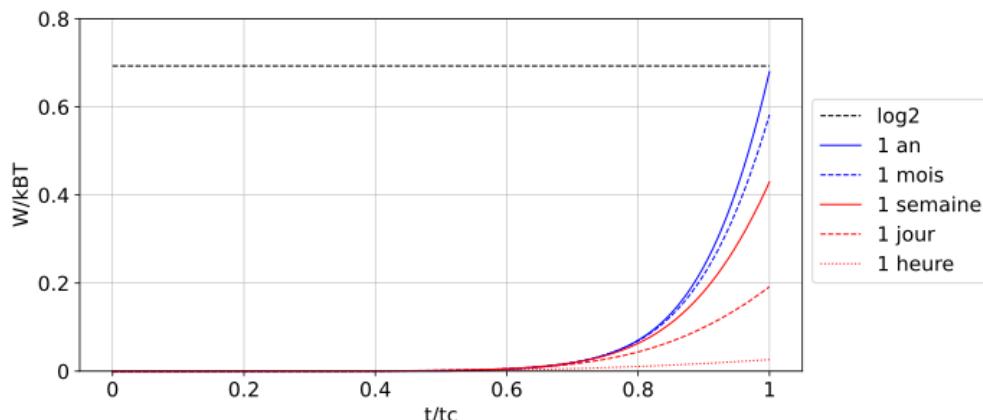


Figure 10. L'énergie W récupérée par l'actionneur durant la dernière phase en fonction de sa durée t_c .

Au cours de l'expérience, le résultat est $W \simeq 0$ (pour $t = 400$ s). Il faut environ 1 année pour que le processus soit quasi-statique et réversible afin de récupérer l'énergie $W = \log 2$.

A3 Équations quasi-statiques d'une mémoire à bascule

Les équations quasi-statiques de la mémoire à bascule, déduites des équations de la mémoire bistable (annexe A2) sont les suivantes, en prenant $N = 2$:

$$Z = 1 + \exp(-U) \quad [10]$$

⁵ Le calcul détaillé est disponible dans le dépôt : https://github.com/argou/limits_of_landauer_and_second_law

$$P = 1/(1 + \exp(U)) \text{, équivalent à } U = \log\left(\frac{1-P}{P}\right) \text{ et à } \exp(U) = \frac{1-P}{P} \quad [11]$$

$$U_s = P U$$

$$S = -(P \log P + (1 - P) \log(1 - P))$$

$$\text{Nous constatons} \quad Q = \Delta S = \Delta H$$

$$\text{À partir des équations [10] et [11], nous obtenons} \quad Z = \frac{1}{1-P}$$

$$\text{Et à partir de l'équation [8]} \quad \Delta W = \Delta(\log(1 - P)) \quad [12]$$

Application au démon de Maxwell

Dans le dispositif du démon de Maxwell représenté sur la figure 6, la mémoire possède initialement un niveau d'énergie $U_i > 0$ avec une probabilité P_i de l'état 1. Dès qu'une transition vers l'état 1 se produit, U est brusquement abaissé à $U_m \ll 0$ pour stabiliser l'état 1 avec $P_m \simeq 1$. Le travail requis pour cette phase adiabatique est :

$$\Delta W_1 = P_m U_m - U_i = P_m U_m - \log((1 - P_i)/P_i)$$

Ensuite U est ramené de manière quasi-statique à sa valeur initiale U_i . Le travail nécessaire pour la seconde phase est : $\Delta W_2 = \log(1 - P_i) - \log(1 - P_m)$.

$$\text{Ainsi : } \Delta W = \Delta W_1 + \Delta W_2 = \log P_i + P_m U_m - \log(1 - P_m)$$

Comme $P_m \simeq 1$, nous avons finalement :

$$\Delta W \simeq \log P_i \text{ ou } \Delta W \simeq -\log(1 + \exp(U_i)) \quad [13]$$