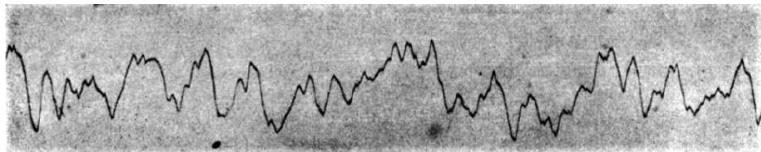


Fluctuations du travail et de la chaleur dans des systèmes mécaniques hors d'équilibre

Frédéric Douarche

Laboratoire de Physique de l'ENS Lyon – CNRS UMR 5672

30 Novembre 2005



1 Introduction

- Contexte scientifique — Motivations
- Fluctuations thermiques à l'équilibre
- Système expérimental
- Mesure de réponse & calibration du système

2 Relations de Jarzynski & Crooks

- Relations de Jarzynski & Crooks
- Test expérimental des relations de Jarzynski & Crooks
- Dynamique de Langevin dans le cas gaussien

3 Relations de Gallavotti-Cohen & Cohen-van Zon

- Théorèmes de fluctuation
- Test expérimental du théorème de fluctuation transitoire
- Test expérimental du théorème de fluctuation stationnaire
- Dynamique de Langevin dans le cas gaussien

4 Conclusion & perspectives

1 Introduction

- Contexte scientifique — Motivations
- Fluctuations thermiques à l'équilibre
- Système expérimental
- Mesure de réponse & calibration du système

Mécanique statistique hors d'équilibre

Très peu de résultats exacts !

Variation d'énergie libre ΔF

- *Egalité de Jarzynski* [C. Jarzynski (1997)]
- *Relation de Crooks* [G. Crooks (1999)]
- *Controverse de Cohen* [E. Cohen, D. Mauzerall (2004)]

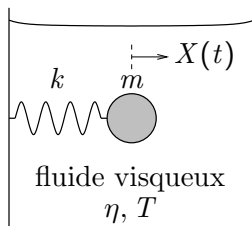
Production d'entropie / chaleur dissipée / puissance injectée

- *Théorème de fluctuation stationnaire*
 - ▶ D. Evans, E. Cohen, G. Morris (1993)
 - ▶ G. Gallavotti, E. Cohen (1995)
 - ▶ R. van Zon, E. Cohen (2003)
- *Théorème de fluctuation transitoire*
 - ▶ D. Evans, D. Searles (2002)
 - ▶ R. van Zon, E. Cohen (2003)

1 Introduction

- Contexte scientifique — Motivations
- **Fluctuations thermiques à l'équilibre**
- Système expérimental
- Mesure de réponse & calibration du système

Modèle : oscillateur harmonique amorti



Position de l'oscillateur : **équation de Newton**

$$m \frac{dV(t)}{dt} = -k X(t) - \eta V(t)$$

- **Constante de temps** $\tau_{\text{relax}} = 2m/\eta = \gamma^{-1}$
- **Résonance** $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ $\omega'_0 = \sqrt{\omega_0^2 - \gamma^2}$
- **3 régimes** ($\gamma \gtrless \omega_0$) : *oscillant amorti, apériodique, — critique*

Fluctuations thermiques à l'équilibre

Equation de Langevin (processus d'Ornstein-Uhlenbeck)

$$m \frac{dV(t)}{dt} = -k X(t) - \eta V(t) + \zeta(t)$$
$$\langle \zeta(t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(t) \zeta(t') \rangle = \beta^2 \delta(t - t')$$

Variance du bruit (force aléatoire) : théorème d'équipartition

$$\frac{k}{2} \text{Var } X(t) \xrightarrow{t \gg \tau_{\text{relax}}} \frac{1}{2} k_B T \quad \Rightarrow \quad \beta^2 = 2\eta k_B T$$

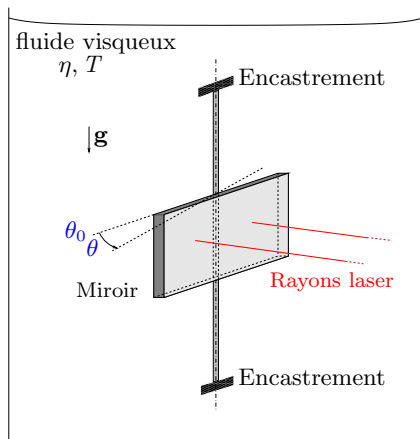
Théorème fluctuation-dissipation :
filtrage linéaire de fonctions aléatoires

$$S_X(\omega) = |\hat{\chi}(\omega)|^2 \times S_\zeta(\omega) = \frac{4\eta k_B T}{(-m\omega^2 + k)^2 + (\eta\omega)^2}$$

1 Introduction

- Contexte scientifique — Motivations
- Fluctuations thermiques à l'équilibre
- **Systeme experimental**
- Mesure de réponse & calibration du système

Système expérimental : oscillateur de torsion



Dimensions

- *Fil de torsion* 1 cm \times 0.5 mm \times 50 μm
- *Miroir* 8 mm \times 2 mm \times 1 mm

Fluctuations thermiques à l'équilibre

Système expérimental :

oscillateur harmonique amorti viscoélastique

$$I\ddot{\theta} + K \star \dot{\theta} + C'\theta = \zeta \quad \xrightarrow{\mathcal{F}} \quad \left(-I\omega^2 + C' - i(C'' + \eta\omega)\right)\hat{\theta}(\omega) = \hat{\zeta}(\omega)$$

Caractéristiques :

- I *moment d'inertie*
- C' *constante de torsion élastique*
- C'' *constante de torsion dissipative*
- η *coefficient de viscosité du fluide*

Théorème fluctuation-dissipation :

spectre des fluctuations à l'équilibre

$$S_{\theta}(\omega) = \frac{4k_B T}{\omega} \frac{C'' + \eta\omega}{(-I\omega^2 + C')^2 + (C'' + \eta\omega)^2}$$

En réalité, pas que la thermique $\zeta(t)$!

Bruit environnemental $\zeta_{\text{env}}(t)$ filtré par l'oscillateur

$$\theta_{\text{mes}}(t) = \theta(t) + \theta_{\text{env}}(t)$$

Rapport signal-sur-bruit : donne la contribution relative de $\theta_{\text{env}}(t)$

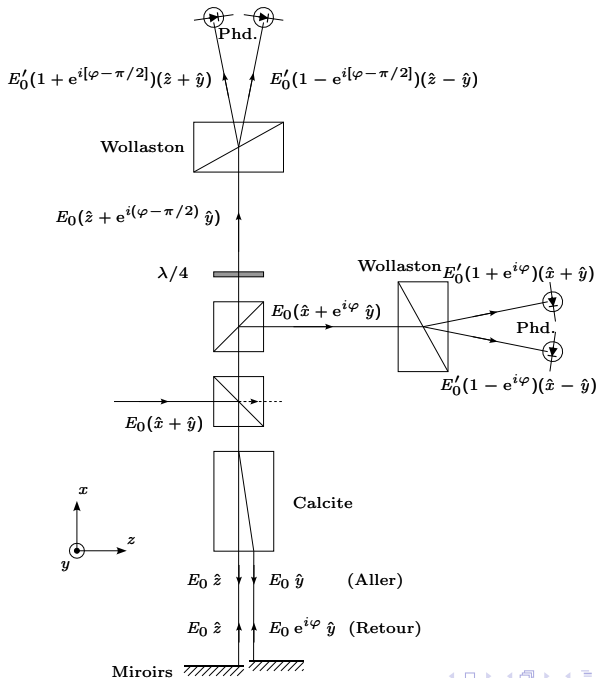
$$\lambda = \frac{S_{\theta}(\omega)}{S_{\theta_{\text{env}}}(\omega)} \sim \frac{4k_B T}{\omega} \frac{C'' + \eta\omega}{I^2} \quad \text{pour } \omega \ll \omega_0$$

- $\lambda \sim I^{-2}$: *minimiser I*
- λ proportionnel à la “viscosité” du système : *système dissipatif*

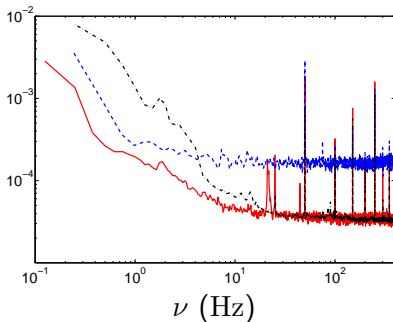
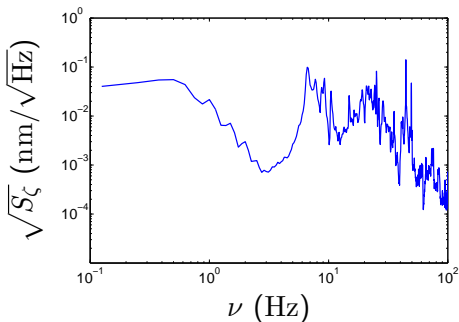
Ordres de grandeur

- *Résonance* $\nu_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{C'/I} \sim 300$ Hz dans l'air
- *Constante de torsion du fil & déplacement typique*
 - ▶ $C' \sim 5 \times 10^{-4}$ N m rad⁻¹

$$\theta_{\text{rms}} = \sqrt{k_B T / C'} \sim 1 \text{ nrad} \quad (10^{-2} \text{ nm})$$

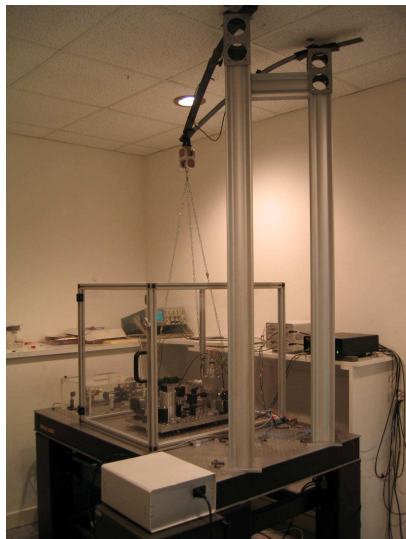
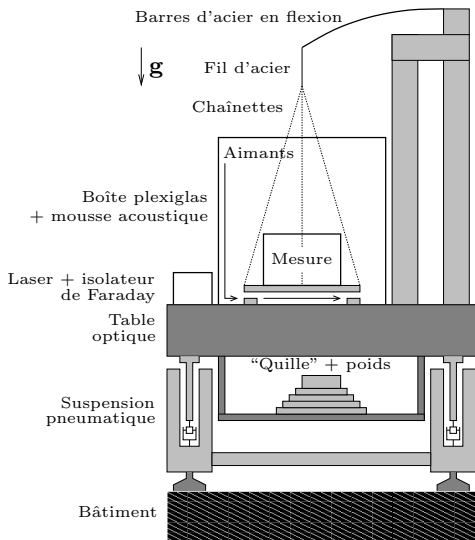


Système de détection : performances (bruit de fond)



Ligne de bruit voisine de 5×10^{-5} nm/ $\sqrt{\text{Hz}}$

Système de détection : isolation du montage

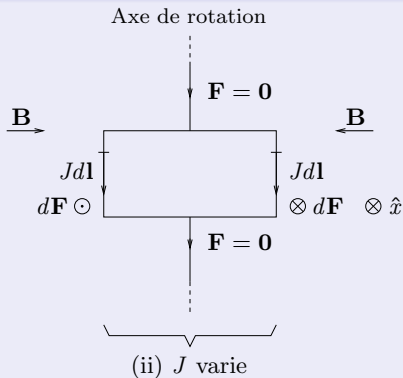
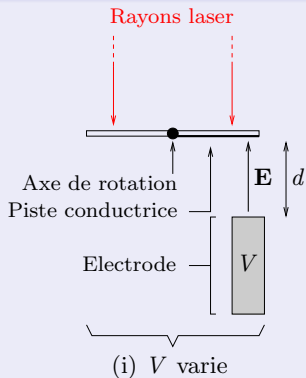


1 Introduction

- Contexte scientifique — Motivations
- Fluctuations thermiques à l'équilibre
- Système expérimental
- Mesure de réponse & calibration du système

Mesurer la réponse $\hat{\theta}(\omega) = \boxed{\hat{\chi}(\omega)} \times \hat{M}(\omega)$

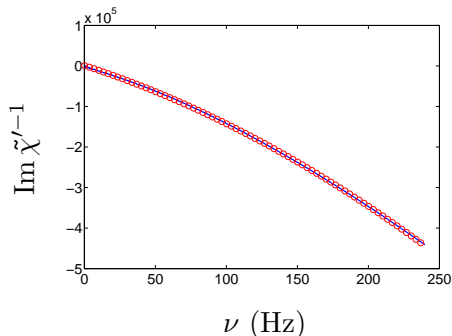
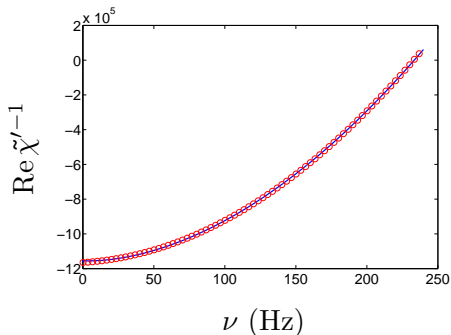
Force électrostatique $F \propto V^2$ / Force magnétique $F \propto BJ$



(i) Air : $V \sim 10 - 100$ Volts $\Rightarrow \theta \sim 10^2 - 10^4$ nrad

(ii) Air/eau/huile : $J \sim 10 - 100 \mu\text{A}$ $\Rightarrow \theta \sim 10^2 - 10^3$ nrad

Calibration de la force

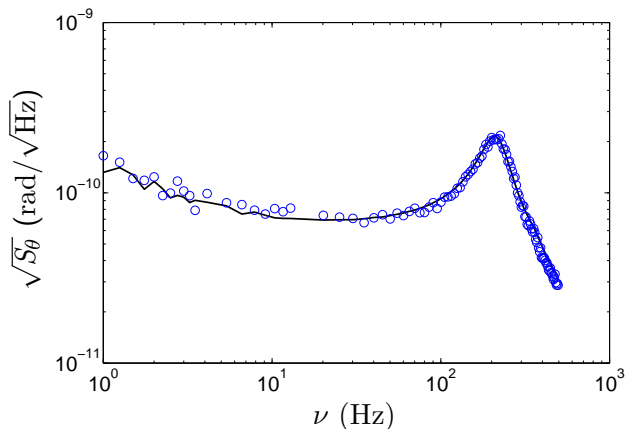


On ne connaît que le paramètre de contrôle de la force :
déterminer le coefficient a

$$\left(-I\omega^2 + C' - i(C'' + \eta\omega)\right)\hat{\theta}(\omega) = \hat{M}(\omega) = a\hat{M}'(\omega)$$

$$[\tilde{\chi}'(\nu)]^{-1} = a^{-1} \left(\boxed{-I(2\pi)^2\nu^2 + C'} - i \boxed{(C'' + 2\pi\eta\nu)} \right) = [a\tilde{\chi}(\nu)]^{-1}$$

Vérification du théorème fluctuation-dissipation



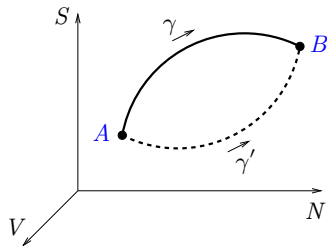
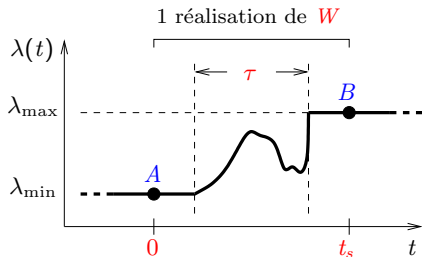
2 mesures indépendantes qui doivent coïncider

- *Spectre des fluctuations thermiques* $S_\theta(\omega)$
- *Spectre tiré de la réponse* $S_\theta(\omega) = \frac{4k_B T}{a\omega} \text{Im} \hat{\chi}'(\omega)$

2 Relations de Jarzynski & Crooks

- Relations de Jarzynski & Crooks
- Test expérimental des relations de Jarzynski & Crooks
- Dynamique de Langevin dans le cas gaussien

Comment évaluer ΔF ?

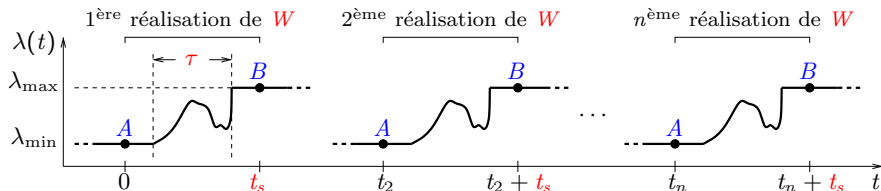


Système (τ_{relax}) en contact avec thermostat (T)

- Etat d'équilibre $A_{t=0} \xrightarrow{\tau}$ état d'équilibre $B_{t=t_s \gg \tau_{\text{relax}}}$
- Evaluer la **variation d'énergie libre ΔF** fournie à un système lors d'une **transformation quelconque** : pour $\tau \gtrsim \tau_{\text{relax}}$
- **Loi de l'accroissement de l'entropie**

$$\delta Q \leq T \delta S \quad \iff \quad W \geq \Delta F = \Delta E - T \Delta S$$

Egalité de Jarzynski



Travail fourni au système pendant la transformation $A \mapsto B$

$$W = \int_0^{t_s} \frac{\partial H_t(x_t, \lambda)}{\partial t} dt = \int_0^{t_s} \frac{\partial H_t(x_t, \lambda)}{\partial \lambda} \dot{\lambda}(t) dt, \quad x_t = (q_t, p_t)$$

Egalité de Jarzynski : ensemble de transformations $\{A \mapsto B : W\}$

$$\Delta F = F_B - F_A = -\beta^{-1} \ln \left\langle e^{-\beta W} \right\rangle$$

Quelques commentaires...

- *Egalité de Jarzynski “contient” le second principe*

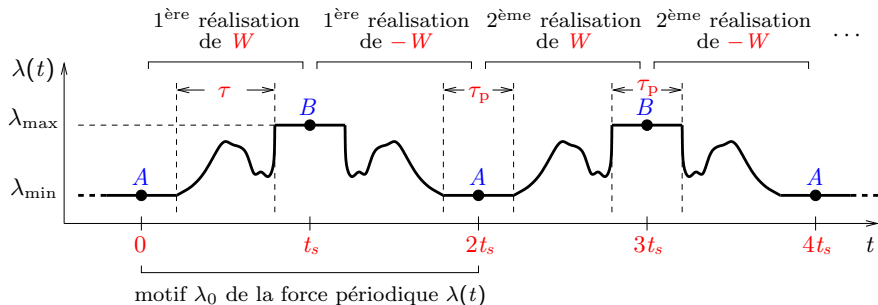
$$W = \Delta F + W_{\text{irr}} \Rightarrow \langle e^{-\beta W_{\text{irr}}} \rangle = 1 \geq e^{-\beta \langle W_{\text{irr}} \rangle}$$

- ▶ *Si \exists une réalisation du travail W telle que $W_{\text{irr}} > 0$
Alors \exists (au moins) une réalisation du travail W telle que $W_{\text{irr}} < 0$*
- ▶ $\langle W_{\text{irr}} \rangle \geq 0 \iff \langle W \rangle \geq \Delta F$

- *Distribution du travail gaussienne*

$$\Delta F = -\beta^{-1} \ln \langle e^{-\beta W} \rangle = \mu - \frac{\beta \sigma^2}{2}, \quad \langle W_{\text{irr}} \rangle = \frac{\beta \sigma^2}{2} > 0$$

Relation de Crooks



Relation de Crooks : renversement du temps

$$P(W) = P'(-W) e^{\beta(W - \Delta F)}$$

- Point de croisement des distributions $P(W)$ et $P'(-W)$ donne ΔF
- “Contient” l'égalité de Jarzynski $\int(\dots) \times e^{-\beta W} dW$

- 2 Relations de Jarzynski & Crooks
 - Relations de Jarzynski & Crooks
 - Test expérimental des relations de Jarzynski & Crooks
 - Dynamique de Langevin dans le cas gaussien

Evaluer ΔF autrement et simplement

Evaluer ΔE

- *Energie potentielle* $V_t(\theta, M) = \frac{1}{2} C \theta^2 - M \theta$
- *Variation d'énergie cinétique* $\langle \Delta K \rangle = \langle K_B - K_A \rangle = 0$
- *Variation d'énergie du corps* $\Delta E = \langle \Delta V_t \rangle$

$$\Delta E = -\frac{M_B^2}{2C} = -\frac{1}{2} C \langle \theta_B \rangle^2$$

Energie libre $\Delta F = \Delta E - T \Delta S - S \Delta T$

- Transformation telle que $T_A = T_B = T_{\text{thermostat}} \Rightarrow \Delta T = 0$
- Terme $T \Delta S \stackrel{?}{=} 0$ Oui pour un système purement mécanique

Travail classique et variation d'énergie libre intrinsèque

Travail classique

$$W = - \int_0^{t_s} \dot{M} \theta dt = - [M\theta]_0^{t_s} - W_{\text{cl}}, \quad W_{\text{cl}} = - \int_0^{t_s} M \dot{\theta} dt$$

- $- [M\theta]_0^{t_s} =$ *variation d'énergie potentielle du corps induite par la force pendant la transformation*

Variation d'énergie libre intrinsèque

$$\Delta F_0 = \Delta F - \phi, \quad \phi = - [M\theta]_0^{t_s}$$

- *Eq. du mvt linéaire* $\Delta F_0 = -\Delta F = \frac{1}{2} C \langle \theta_B \rangle^2 = \frac{M_B^2}{2C}$
- *Eq. du mvt N.-L.* $\Delta F_0 = \frac{1}{3} \sqrt{\frac{2}{C}} M_B^{3/2} = -\frac{1}{2} \Delta F$

Point de croisement des distributions du travail

Distributions $P(W) \sim N(\mu, \sigma^2)$ et $P'(-W) \sim N(\mu', \sigma'^2)$

- *Calcul simple* + $[\sigma^2 \simeq \sigma'^2]$

$$P(W) = P'(-W) e^{\frac{\mu + \mu'}{\sigma^2} \left(W - \frac{\mu - \mu'}{2} \right)}$$

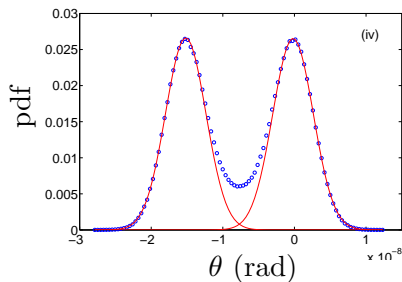
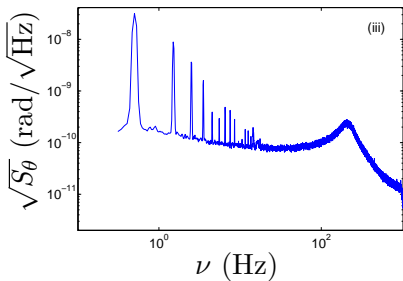
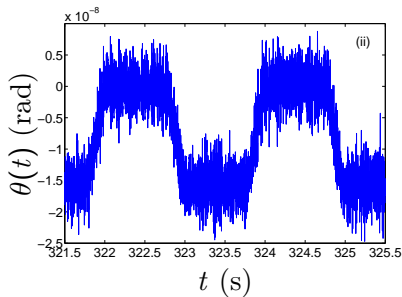
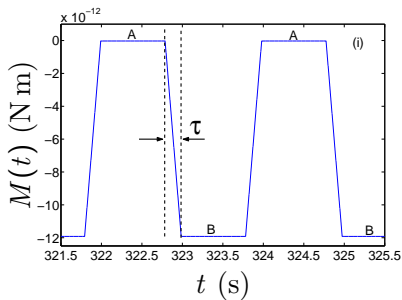
- *Point de croisement* $W_0 = \frac{\mu - \mu'}{2} \stackrel{?}{=} \Delta F_0$
- *Décomposition* $W = \Delta F_0 + W_{\text{irr}}$

$$\Delta F_0 = \frac{\mu - \mu'}{2}$$

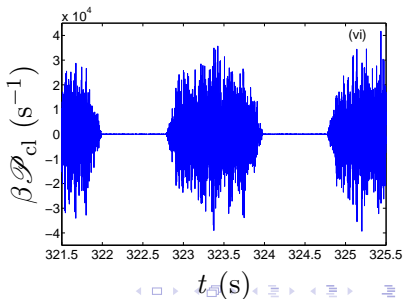
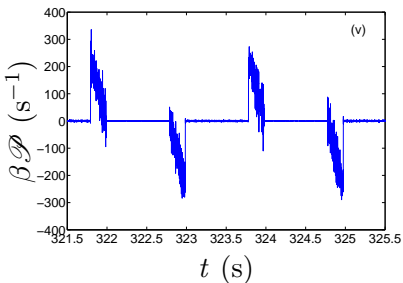
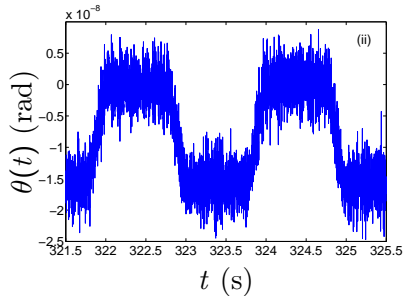
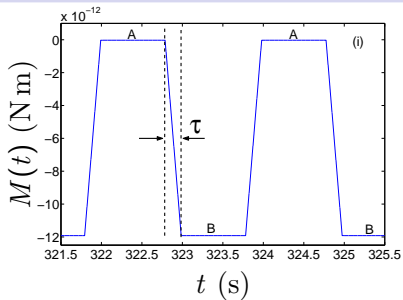
Point de croisement = ΔF_0

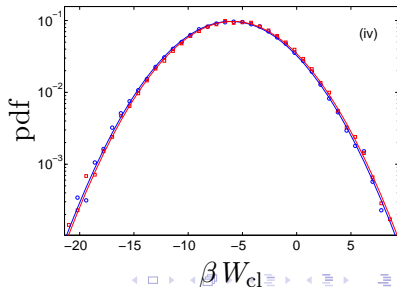
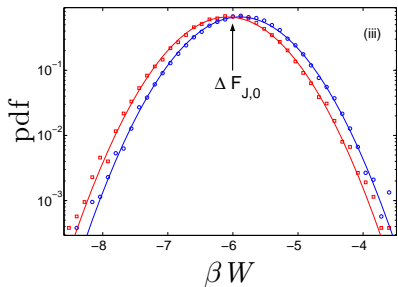
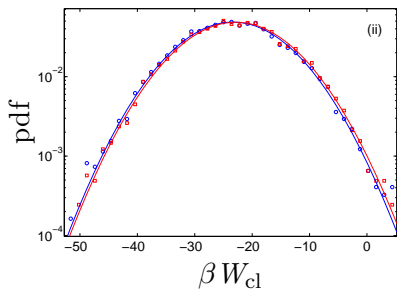
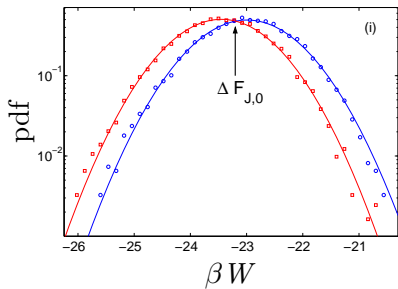
- ▶ *Travail classique* $\mu_{\text{cl}} + \mu'_{\text{cl}} = 2 \langle W_{\text{irr}} \rangle \leftrightarrow \sigma_{\text{cl}}^2$
- ▶ *Travail thermodynamique* $\mu + \mu' = 2 \langle W_{\text{irr}} \rangle = \beta \sigma^2$

Résultats expérimentaux

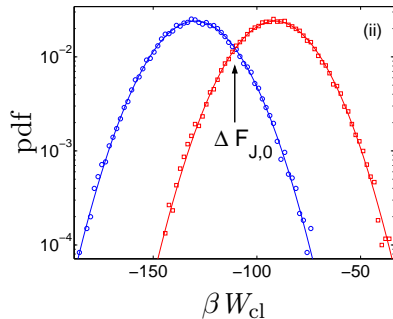
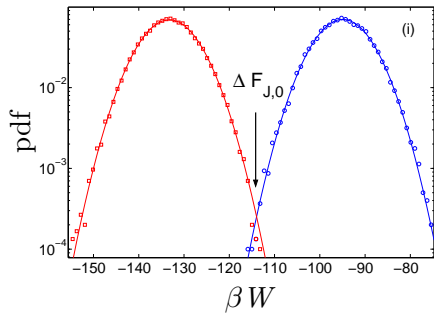


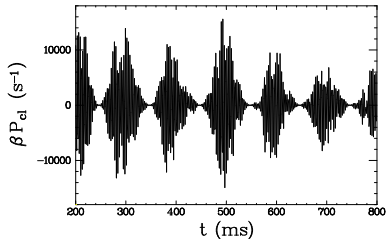
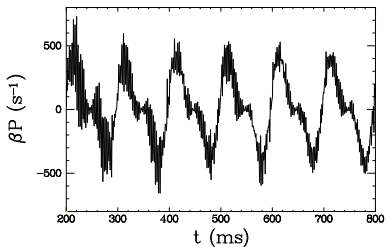
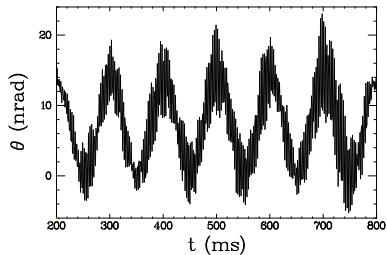
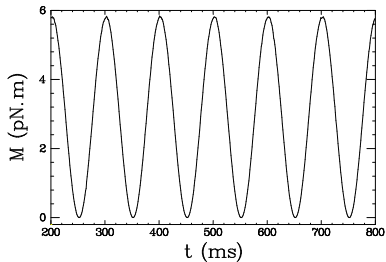
$$\mathcal{P} = -\dot{M}\theta \quad \mathcal{P}_{cl} = -M\dot{\theta}$$





Transformations irréversibles $\tau/\tau_{\text{relax}} = 0.1$





Résultats expérimentaux : résumé

τ/τ_{relax}	M_{max}	$-(\Delta F + \phi)$	$\Delta F' + \phi$	$-(W_0 + \phi)$	$-W_{\text{cl},0}$	ΔV
8.5	8.3	23.5	23.1	23.5	23.4	23.8
4.2	0.8	0.21	0.20	0.22	0.21	0.22
3.5	4.3	6.1	5.9	6.5	6.1	6.1
2.8	3.0	2.8	2.6	3.2	2.9	2.7
0.85	4.2	6.6	6.1	6.0	6.6	6.1
0.11	11.8	33	30.8	32.54	31.15	31.4
0.11	22.1	117.6	110.5	114	110.1	111
0.08	5.8	10.3	10.0	10.1	10.1	10.3
0.08	14.9	67.4	65.5	66.8	66.4	67.5

Conclusion & perspectives

- *Etude expérimentale en faveur des résultats de Jarzynski / Crooks*
Extension des hypothèses ?
- *Oui, mais régime très proche de l'équilibre + statistique gaussienne*
Etude pour un système non linéaire ?

- 2 Relations de Jarzynski & Crooks
 - Relations de Jarzynski & Crooks
 - Test expérimental des relations de Jarzynski & Crooks
 - Dynamique de Langevin dans le cas gaussien

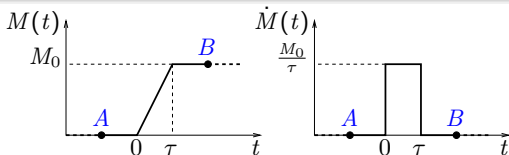
Dynamique de Langevin dans le cas gaussien (1)

But

$$\text{Calculer } \langle W_t \rangle \text{ et } \langle (\delta W_t)^2 \rangle \longrightarrow \Delta F_t = \langle W_t \rangle - \langle (\delta W_t)^2 \rangle / 2k_B T$$

Dynamique de Langevin 1^{er} et 2^{ème} ordre

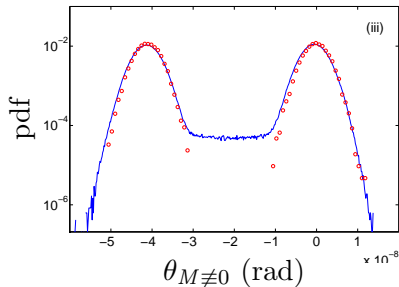
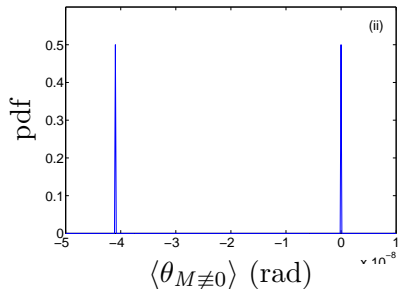
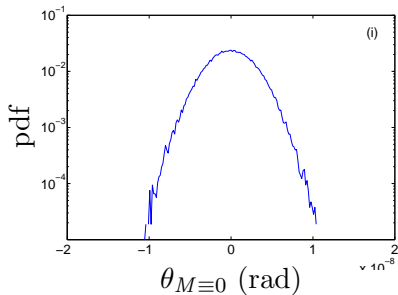
$$I \ddot{\theta}(t) + \eta \dot{\theta}(t) + C \theta(t) = M(t) + \zeta(t)$$
$$\langle \zeta(t) \rangle = 0, \quad \langle \zeta(t) \zeta(t') \rangle = 2\eta k_B T \delta(t - t')$$



Résultat

$$\Delta F_t = -\frac{M_0^2}{2C} \longrightarrow \text{indépendant de } \tau \text{ et } \tau_{\text{relax}} !$$

Indépendance statistique $\theta(t) = \bar{\theta}(t) + \delta\theta(t)$



Dynamique de Langevin dans le cas gaussien (2)

Travail $W_t = - \int_0^t \dot{M}(t') \theta(t') dt'$

$$W_t = - \frac{M_0}{\tau} \int_0^t (\bar{\theta}(t') + \delta\theta(t')) dt' = \bar{W}_t + \delta W_t$$

- W_t et δW_t statistiquement indépendants
- $\delta\theta(t)$ gaussien \Rightarrow δW_t gaussien

Variance du travail $\langle (\delta W_t)^2 \rangle \propto \langle y_t^2 \rangle$

$$y_t = \int_0^t \delta\theta(t') dt', \quad \langle y_t^2 \rangle = \int_0^t \int_0^t R_{\delta\theta}(t_1 - t_2) dt_1 dt_2$$

Résultat $\Delta F_t = - \frac{M_0^2}{2C}$

Jarzynski / Crooks : limites d'applicabilité

Conditions nécessaires

- *Systeme essentiellement sensible au bruit thermique $\zeta(t)$*
- *Energie de perturbation $\sim k_B T$*

Peut-on tester Jarzynski à forte amplitude de forçage ?

- *Attention au bruit*
- *Augmenter drastiquement la statistique au fur et à mesure que M_0 croît !*
 - ▶ *Distance séparant les maxima des distributions $P(W)$ et $P'(-W) \sim M_0^2$*
 - ▶ *Largeur relative $|\sigma_W / \langle W \rangle|$ de la distribution $P(W) \sim M_0^{-1}$*

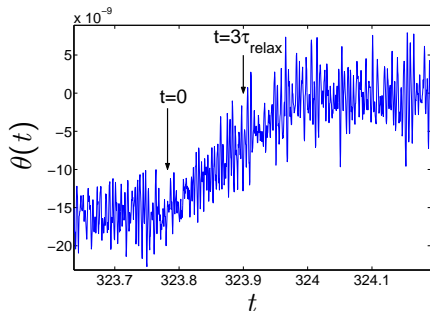
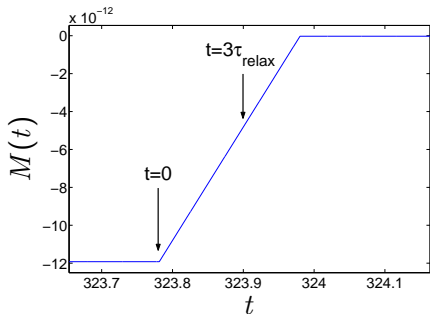
Systeme N.-L. : le débat reste ouvert

- *Réaliser une N.-L. est possible mais difficile !*

3 Relations de Gallavotti-Cohen & Cohen-van Zon

- Théorèmes de fluctuation
- Test expérimental du théorème de fluctuation transitoire
- Test expérimental du théorème de fluctuation stationnaire
- Dynamique de Langevin dans le cas gaussien

Théorèmes de fluctuation (1)



2 régimes

- *Hors d'équilibre transitoire*
- *Hors d'équilibre stationnaire*

$$p_{\tau} = -\frac{1}{\tau} \int_0^{\tau < 3\tau_{\text{relax}}} M \dot{\theta} dt$$

$$p_{\tau} = -\frac{1}{\tau} \int_{t > 3\tau_{\text{relax}}}^{t+\tau} M \dot{\theta} dt$$

Théorèmes de fluctuation (2)

Théorème de fluctuation **stationnaire**

$$\frac{\pi_\tau(p)}{\pi_\tau(-p)} \sim e^{\tau[\beta p + O(1/\tau)]} \quad \text{pour } \tau \rightarrow \infty$$

- $\pi_\tau(\pm p)$: probabilités d'observer un **taux de production d'entropie** $\pm p$, pour une trajectoire x_t de durée τ
- Approche systèmes dynamiques dissipatifs à grand nombre de degrés de liberté (**taux de contraction de l'espace des phases**)

Théorème de fluctuation **transitoire**

$$\frac{\pi_\tau(p)}{\pi_\tau(-p)} = e^{\beta\tau p} \quad \text{quel que soit } \tau$$

- Langevin 1^{er} ordre (**taux de production de la chaleur**)

3 Relations de Gallavotti-Cohen & Cohen-van Zon

- Théorèmes de fluctuation
- Test expérimental du théorème de fluctuation transitoire
- Test expérimental du théorème de fluctuation stationnaire
- Dynamique de Langevin dans le cas gaussien

Test des théorèmes de fluctuation : stratégie

Puissance injectée

$$p_\tau = \frac{1}{\tau} W_\tau = \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\tau} \mathcal{P}_{\text{cl}}(t') dt', \quad \mathcal{P}_{\text{cl}} = -M\dot{\theta}$$

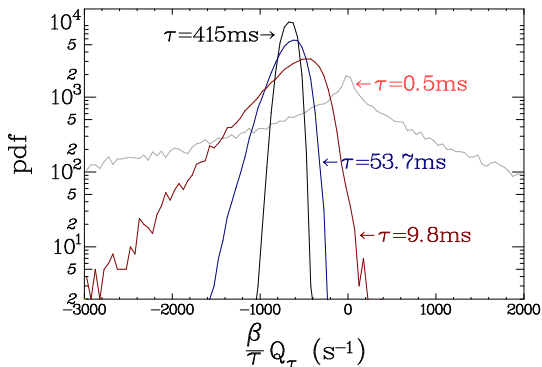
Puissance dissipée

$$p_\tau = \frac{1}{\tau} Q_\tau = \frac{\eta}{\tau} \int_t^{t+\tau} \dot{\theta}^2(t') dt' = -\frac{1}{\tau} \left(W_{\text{cl},\tau} + [T + V]_t^{t+\tau} \right)$$

Stratégie

- Déterminer les distributions $P(p_\tau)$
- Calculer les “fonctions de symétrie” $S_\tau = \frac{1}{\tau} \ln \frac{P(+p_\tau)}{P(-p_\tau)}$
- Transitoire $S_\tau \stackrel{?}{=} p_\tau$ Stationnaire $S_\tau \stackrel{?}{\sim} p_\tau + O(1/\tau)$

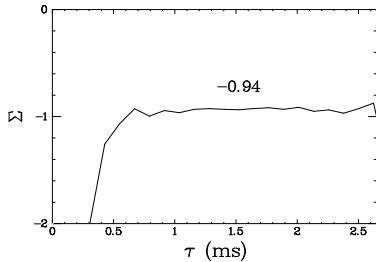
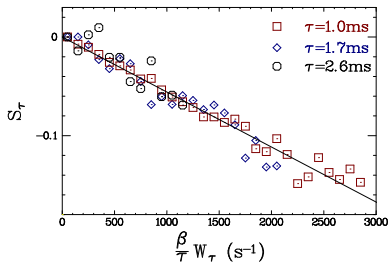
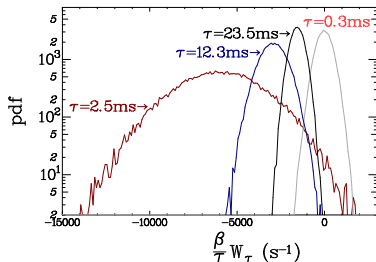
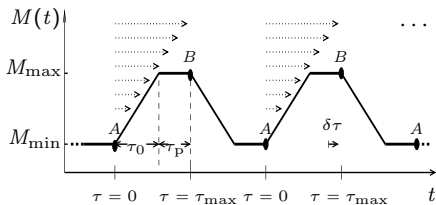
Test du théorème de fluctuation transitoire (1)



Chaleur

Comportement assez compliqué
Etude en cours

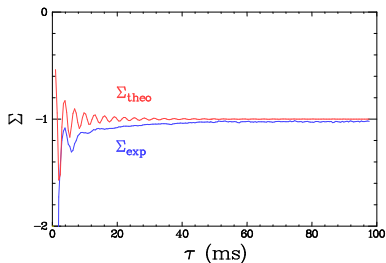
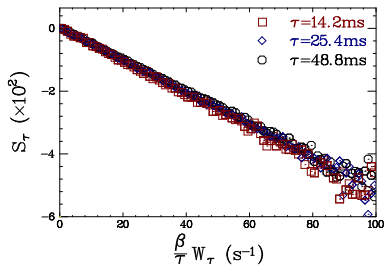
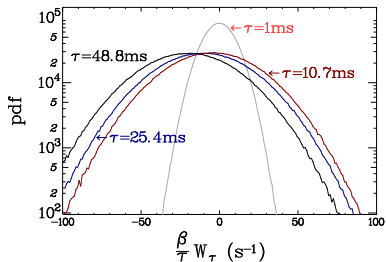
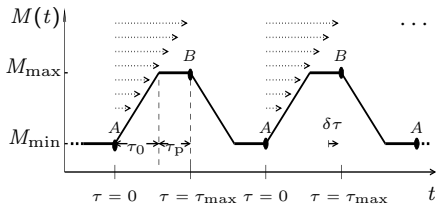
Test du théorème de fluctuation transitoire (2)



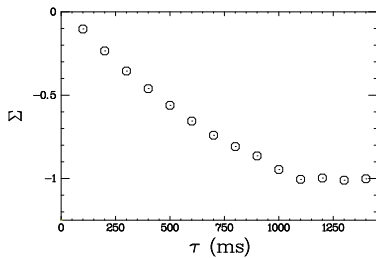
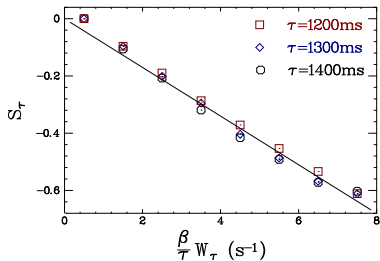
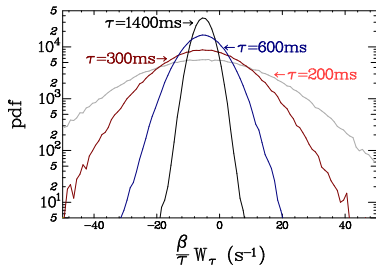
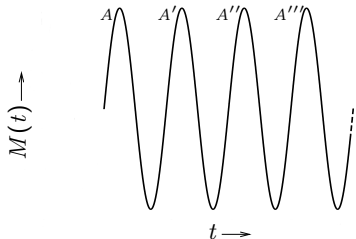
3 Relations de Gallavotti-Cohen & Cohen-van Zon

- Théorèmes de fluctuation
- Test expérimental du théorème de fluctuation transitoire
- **Test expérimental du théorème de fluctuation stationnaire**
- Dynamique de Langevin dans le cas gaussien

Test du théorème de fluctuation stationnaire (1)



Test du théorème de fluctuation stationnaire (2)



3 Relations de Gallavotti-Cohen & Cohen-van Zon

- Théorèmes de fluctuation
- Test expérimental du théorème de fluctuation transitoire
- Test expérimental du théorème de fluctuation stationnaire
- Dynamique de Langevin dans le cas gaussien

Conclusion

- *Étude d'un système expérimental contrôlé*
Oscillateur amorti viscoélastique
- *Etude des relations de Jarzynski / Crooks*
 - ▶ *Limitée à système linéaire + fluctuations gaussiennes*
 - ▶ *Théorie : extension des hypothèses ?*
- *Etude des relations de Gallavotti-Cohen / Cohen-van Zon*
 - ▶ *Etude en cours (chaleur, ...)*
 - ▶ *Théorie : extension des hypothèses ?*

Perspectives

- *Systèmes N.-L.*
 - ▶ *Couplage électrostatique (effet des pointes)*
 - ▶ *Effet Casimir (sous vide)*
- *Systèmes vieillissants*
 - ▶ *Améliorer l'isolation du montage*
(+ technique de réduction du bruit)
 - ▶ *Appliquer ces théorèmes de fluctuation (+ extension TFD)*