

# Synthèse et expériences numériques liées à un article de recherche

Conductivité thermique négative des chaînes de rotors avec forçage mécanique

David Frenkiel

Cours 5MM50  
Sorbonne Université

March 3, 2022

## Partie I

# Synthèse - Dynamique hors équilibre

Synthèse des sections 7.2, 7.3, 7.4, et 7.5 des notes de cours :

**Introduction à la physique statistique numérique [1]**

Gabriel Stoltz.

[http://cermics.enpc.fr/~stoltz/Cours/intro\\_phys\\_stat.pdf](http://cermics.enpc.fr/~stoltz/Cours/intro_phys_stat.pdf)

## Synthèse - Dynamique hors équilibre

La dynamique hors équilibre caractérise un système qui n'est pas réversible. Physiquement, un tel système présente un flux d'énergie (chaleur) d'une partie du système vers une autre.

Ici, on suscite une dynamique hors équilibre, et donc un flux d'énergie, en appliquant au système des forçages thermiques et mécaniques.

Lorsque le gradient de température est faible (et sans forçage), le flux reste linéaire, et la loi de Fourier s'en applique. En revanche, dès que le gradient de température est plus important, la dynamique devient beaucoup plus compliquée. Il n'existe pas une théorie générale dans ce cas.

## Synthèse - Dynamique hors équilibre

En général il n'est pas possible de déterminer analytiquement la mesure invariante d'un système hors équilibre. En particulier, cette mesure dépend des détails de la dynamique d'une manière non-triviale à cause des corrélations de longue portée.

Par exemple, pour la dynamique perturbée,

$$dq_t = (-V'(q) + F)dt + \sqrt{2}dW_t,$$

la mesure invariante  $\psi_F$  est

$$\psi_F(q) = Z_F^{-1} \int_0^1 e^{V(q+y) - V(q) - Fy} dy.$$

Si  $F \neq 0$ , cette mesure dépend des valeurs de  $V$  partout.

## Partie II

### Article de recherche

**Negative thermal conductivity of chains of rotors with mechanical forcing [2]**

Alessandra Iacobucci, Frédéric Legoll, Stefano Olla, et Gabriel Stoltz

<https://arxiv.org/abs/1107.1766>

## Article de recherche

L'article porte sur le comportement particulier des chaînes de rotors soumises aux forçages thermiques et mécaniques. Ce système hors équilibre présente quelques propriétés remarquables :

- ▶ Des profils non linéaires inhabituels de température et de vitesse
- ▶ La température est maximale vers le centre de la chaîne
- ▶ Cependant, l'équilibre local se maintient pour des chaînes longues.
- ▶ Lorsque le forçage mécanique est suffisamment fort, le flux d'énergie peut être augmenté par un gradient de **température inverse**.

## Modèle - Chaîne de rotors

Une chaîne de rotors modélise un système unidimensionnel où chaque molécule interagit avec ces 2 voisins sous l'influence d'un potentiel périodique.

Ce modèle s'applique, par exemple, aux rotations des paires de bases de l'ADN ou des séries de jonctions Josephson [3].

- ▶ Position (angle) du rotor  $i$  :  $q_i \in [0, 2\pi]$
- ▶ Impulsion du rotor  $i$  :  $p_i \in \mathbb{R}$
- ▶ Potentiel :  $V = \sum_i 1 - \cos(q_i - q_{i-1})$

## Modèle - Chaîne de rotors

On considère ici une dynamique où la chaîne est soumise aux forces thermiques et mécaniques. La masse de chaque rotor est 1.0, et les rotors à gauche et à droite sont attachés aux thermostats de Langevin.

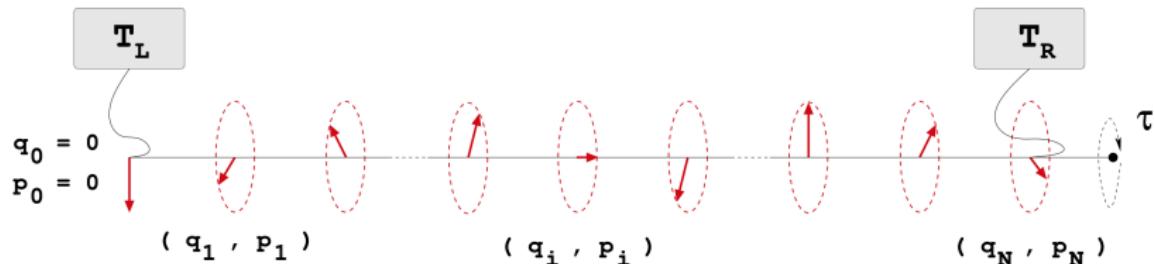
Le rotor à gauche est collé à la paroi, tandis que le rotor à droite est soumis à une force externe constante.

En collant le rotor à gauche à la paroi, on retire l'invariance par translation du système.

On verra que la combinaison de ces 2 influences suscite des phénomènes surprenants. Par exemple, sous certain conditions, l'augmentation de la température à droite **réduit** le flux d'énergie vers la gauche.

## Modèle - Chaîne de rotors

Une chaîne de rotors (sans forçage) avec des thermostats à gauche et à droite. Le rotor à gauche est collé à la paroi.



Source : Alessandra Iacobucci, Nonequilibrium stationary states of rotor and oscillator chains [2].

## Modèle - Thermostat de Langevin

Un thermostat de Langevin agit comme un bain chauffant. Un objet immergé dans un tel bain est frappé rapidement par des petites particules, ce qui induit un changement de la vitesse (température) de l'objet. Par ailleurs, lorsqu'il se déplace, l'objet est restreint par les particules du bain, ce qui réduit sa vitesse.

Ce comportement est un type de fluctuation-dissipation. C'est exactement ce qu'on observe dans le mouvement brownien. Un grain de pollen immergé dans l'eau, par exemple, est poussé par l'agitation thermique des molécules de l'eau, et, simultanément, le grain est restreint par la viscosité de l'eau.

## Modèle - Thermostat de Langevin

Mathématiquement, un thermostat de Langevin s'exprime alors comme la somme de ces 2 forces : celle de la dissipation et celle de la fluctuation. Son effet sur le mouvement cinétique est donné par

$$dp = -\gamma pdt + \sigma dW_t,$$

où  $W_t$  est un processus de Wiener standard, et  $\sigma$  et  $\gamma$  sont liés par la relation de fluctuation-dissipation :

$$\sigma^2 = 2\gamma mkT$$

Avec  $m = k = 1$ , on a donc

$$dp = -\gamma pdt + \sqrt{2\gamma T_L} dW_t$$

## Modèle - Hamiltonien

Avec le potentiel  $V = \sum_i 1 - \cos(q_i - q_{i-1})$  on a le hamiltonien

$$H(q, p) = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_i^2}{2} + (1 - \cos(q_i - q_{i-1})) \right]$$

Et les équations de Hamilton,

$$dq_i = p_i dt,$$

$$dp_i = (\sin(q_{i+1} - q_i) - \sin(q_i - q_{i-1})) dt$$

## Modèle - Équations d'évolution

En combinant les équations de Hamilton, le forçage  $F$ , et des thermostats de Langevin à gauche et à droite de la chaîne, on en tire les équations d'évolution du système :

$$dq_i = p_i dt,$$

$$dp_i = (\sin(q_{i+1} - q_i) - \sin(q_i - q_{i-1}))dt \quad (i \neq 1, N),$$

$$dp_1 = (\sin(q_2 - q_1) - \sin(q_1))dt - \gamma p_1 dt + \sqrt{2\gamma T_L} dW_t^1,$$

$$dp_N = (F - \sin(q_N - q_{N-1}))dt - \gamma p_N dt + \sqrt{2\gamma T_R} dW_t^N$$

## Schéma

Moyennant une stratégie de scission (splitting), le schéma numérique s'exprime comme une combinaison de l'intégration du processus d'Ornstein-Uhlenbeck et le schéma de Verlet :

$$\tilde{p}_1^n = \alpha p_1^n + \sigma_L G_1^n,$$

$$\tilde{p}_N^n = F + \alpha(p_N^n - F) + \sigma_R G_N^n,$$

$$\tilde{p}_i^n = p_i^n, i \neq 1, N,$$

$$p_i^{n+1/2} = \tilde{p}_i^n - \frac{\Delta t}{2} \frac{H}{q_i}(q^n, \tilde{p}^n),$$

$$q_i^{n+1} = q_i^n + \Delta t p_i^{n+1/2},$$

$$p_i^{n+1} = p_i^{n+1/2} - \frac{\Delta t}{2} \frac{H}{q_i}(q^{n+1}, p^{n+1/2}),$$

où  $\alpha = e^{-\gamma \Delta t}$ ,  $\sigma_L = \sqrt{(1 - \alpha^2) T_L}$ , et  $\sigma_R = \sqrt{(1 - \alpha^2) T_R}$ . Et  $G_1^n$  et  $G_N^n$  sont des variables aléatoires gaussiennes.

## Schéma

Les 3 premières lignes du schéma constituent l'intégration du processus d'Ornstein-Uhlenbeck, qui représente l'influence des thermostats et du forçage sur le système. Les thermostats n'agissent que sur le premier et le dernier rotor ( $i = 1, N$ ).

Les 3 dernières lignes constituent le schéma de Verlet, qui représente l'évolution Hamiltonienne du système.

Pour toutes les expériences numériques  $\gamma = 1$ , et on utilise un pas de temps  $\Delta t = 0.05$ .

## Schéma d'Ornstein-Uhlenbeck

Dans les équations d'évolution il y a une partie liée à l'Hamiltonien, et une partie stochastique (pour les rotors à gauche et à droite).

La partie stochastique est le processus d'Ornstein-Uhlenbeck, qui s'écrit

$$dp_t = \theta(\mu - p_t)dt + \sigma dW_t$$

Pour le rotor à gauche, on a  $\theta = \gamma$ ,  $\mu = 0$ , et  $\sigma = \sqrt{2\gamma T_L}$ . Pour le rotor à droite, on a  $\theta = \gamma$ ,  $\mu = F/\gamma$ , et  $\sigma = \sqrt{2\gamma T_R}$ .

## Schéma d'Ornstein-Uhlenbeck

Par la formule d'Itô et la méthode de la variation de la constante, la solution du processus d'Ornstein-Uhlenbeck s'écrit

$$p_t = p_0 e^{-\theta t} + \mu(1 - e^{-\theta t}) + \sigma \int_0^t e^{-\theta(t-s)} dW_s$$

Comme l'intégrale d'une fonction déterministe par rapport au mouvement brownien est une variable aléatoire gaussienne,  $p_t$  est gaussienne.

## Schéma d'Ornstein-Uhlenbeck

Moyennant l'isométrie d'Itô, on en tire l'espérance et la variance de  $p_t$  :

$$\mathbb{E}[p_t] = p_0 e^{-\theta t} + \mu(1 - e^{-\theta t})$$

$$\text{Var}(p_t) = \frac{\sigma^2}{2\theta}(1 - e^{-2\theta t})$$

Donc, sachant la valeur du processus au temps  $t$ , la valeur du processus au temps  $t + \Delta t$  est donnée par

$$p_{t+\Delta t} = p_t e^{-\theta \Delta t} + \mu(1 - e^{-\theta \Delta t}) + \sigma \sqrt{\frac{(1 - e^{-2\theta \Delta t})}{2\theta}} G,$$

où  $G$  est une variable aléatoire gaussienne standard.

## Schéma d'Ornstein-Uhlenbeck

Donc, avec  $\theta = \gamma$ ,  $\mu = 0$ , et  $\sigma = \sqrt{2\gamma T_L}$ , on a

$$p_{t+\Delta t} = p_t e^{-\gamma \Delta t} + \sqrt{(1 - e^{-2\gamma \Delta t}) T_L} G.$$

Et avec  $\theta = \gamma$ ,  $\mu = F/\gamma$ , et  $\sigma = \sqrt{2\gamma T_R}$ , on a

$$p_{t+\Delta t} = p_t e^{-\gamma \Delta t} + \frac{F}{\gamma} (1 - e^{-\gamma \Delta t}) \sqrt{(1 - e^{-2\gamma \Delta t}) T_R} G.$$

Et finalement, avec  $\gamma = 1$  et  $\alpha = e^{-\gamma \Delta t}$ , on en tire le schéma

$$\tilde{p}_1^n = \alpha p_1^n + \sqrt{(1 - \alpha^2) T_L} G_1^n,$$

$$\tilde{p}_N^n = F + \alpha(p_N^n - F) + \sqrt{(1 - \alpha^2) T_R} G_N^n$$

## Schéma de Verlet

Le schéma de Verlet (ou Störmer-Verlet) est un schéma symplectique basé sur une scission de Strang. Le schéma s'exprime comme une composition de schémas symplectiques :

$$\Phi_{\Delta t}^{\text{Verlet}} = \phi_{\Delta t/2}^2 \circ \phi_{\Delta t}^1 \circ \phi_{\Delta t/2}^2,$$

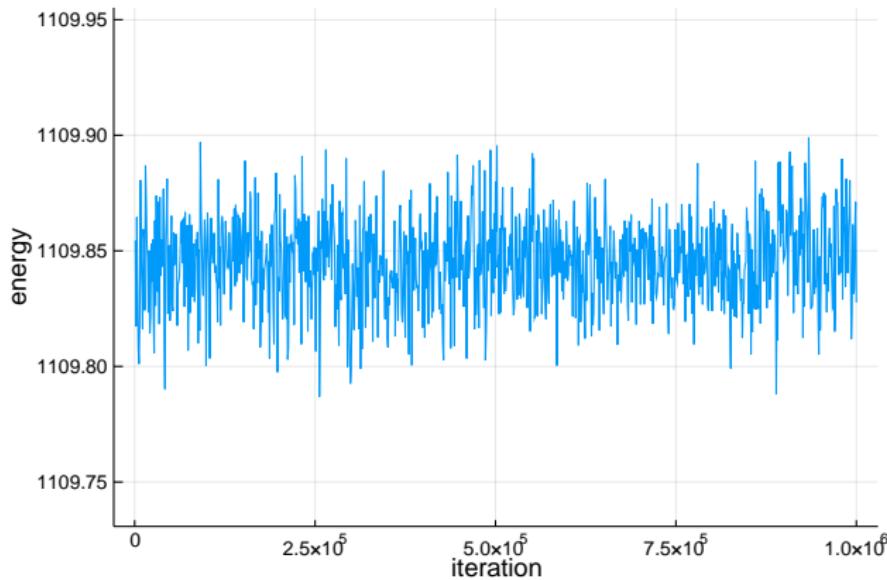
où  $\phi_{\Delta t}^1$  et  $\phi_{\Delta t/2}^2$  sont les flux qui correspondent aux parties potentielles et cinétiques du Hamiltonien :

$$\phi_{\Delta t}^1 = (q + tM^{-1}p, p)$$

$$\phi_{\Delta t/2}^2 = (q, p - t\nabla V(q))$$

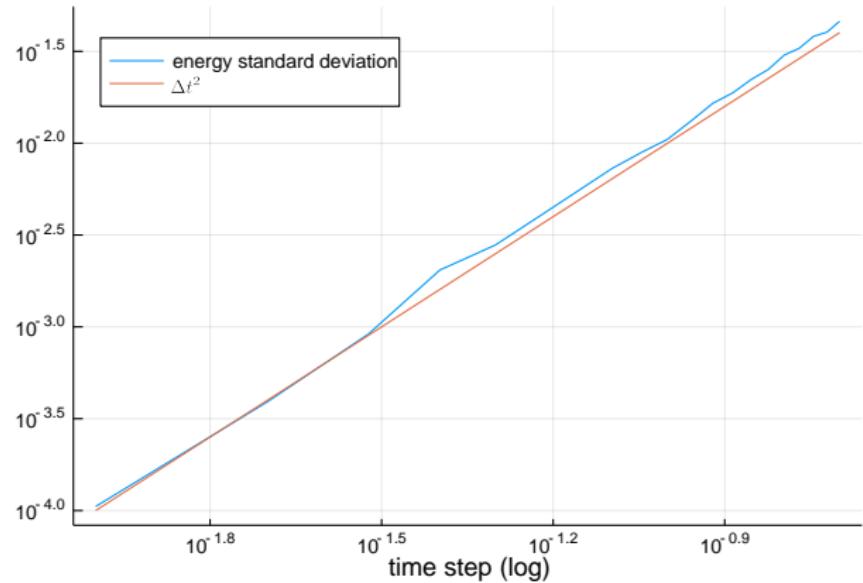
## Schéma de Verlet

On voit bien que le schéma de Verlet préserve l'énergie. Dans ce cas, une chaîne de 1024 rotors a été initialisée avec les positions et les impulsions distribuées selon la loi normale standard.



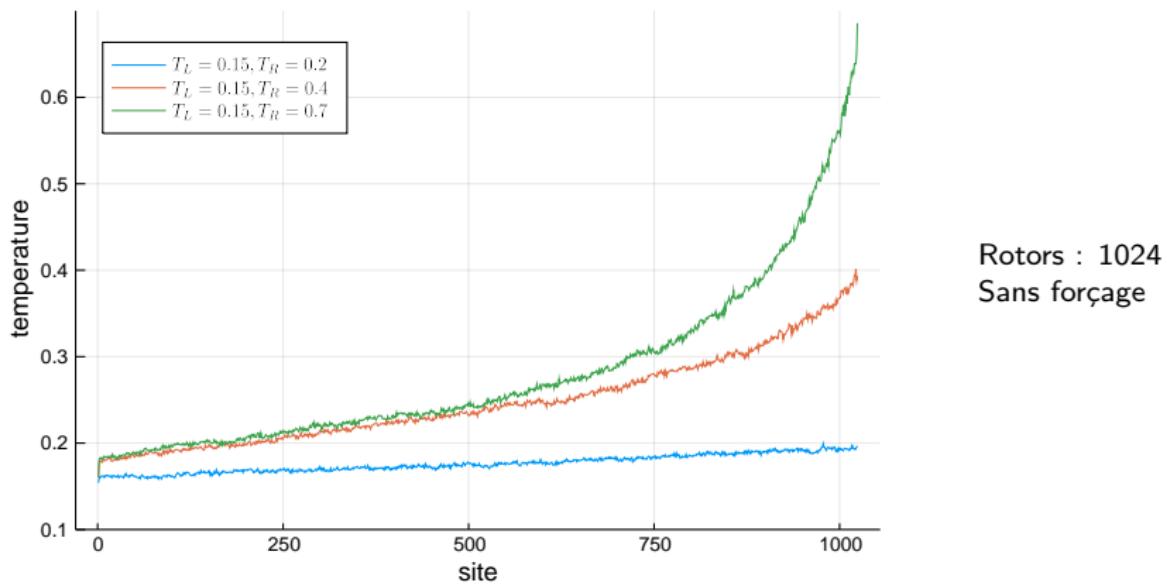
# Schéma de Verlet

L'écart type de l'énergie croît comme  $\Delta t^2$ .



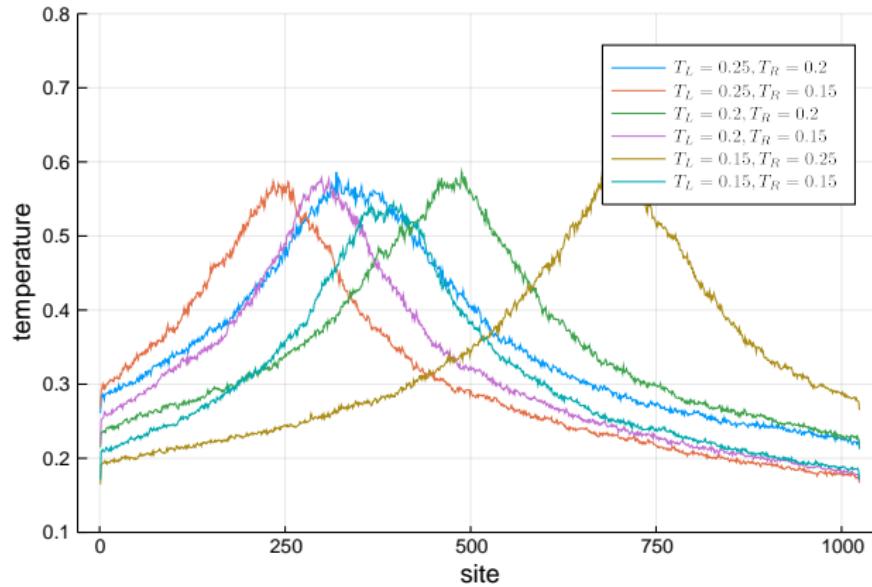
# Température sans forçage

Sans forçage, la température varie linéairement pour une faible gradient. La variation devient non linéaire pour des gradients plus importants car, lorsque le gradient de température est augmenté, la conductivité thermique diminue.



# Température

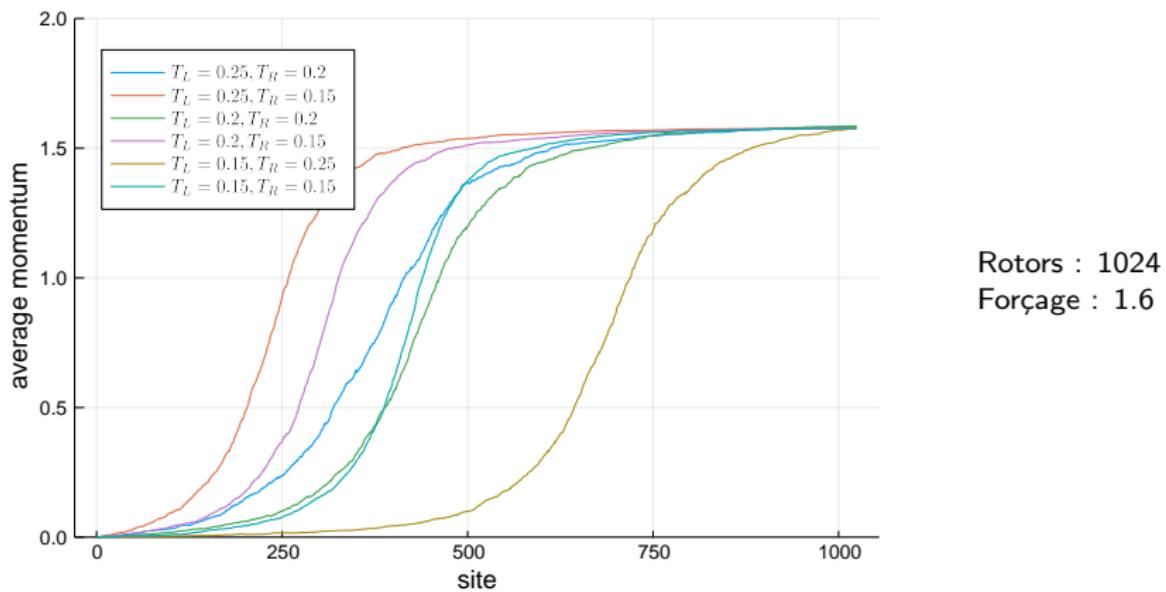
La température est maximum vers le milieu de la chaîne, et la position de ce maximum dépend des valeurs des thermostats.



Rotors : 1024  
Forçage : 1.6

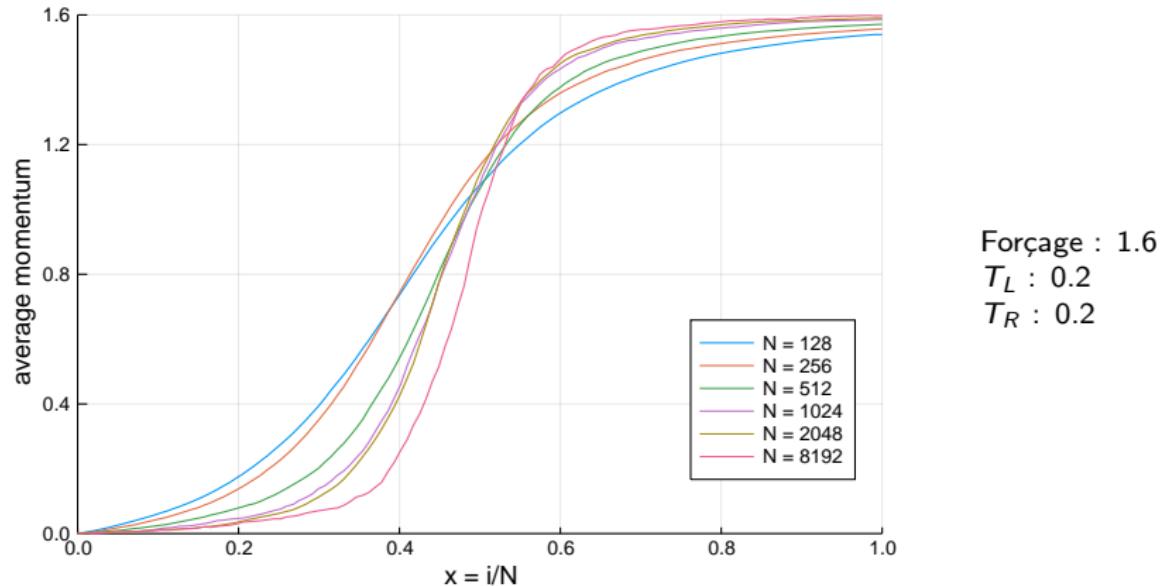
# Impulsion Moyenne

Le profil de l'impulsion moyenne n'est pas linéaire, et la position de sa dérivée maximale coïncide avec la position de la température maximale.



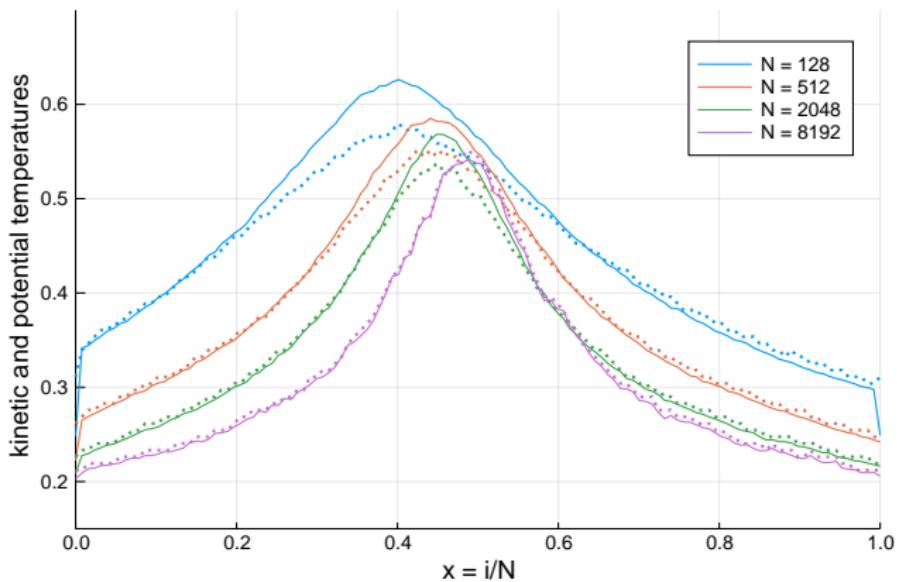
# Impulsion Moyenne

L'impulsion moyenne pour des chaînes de longueurs différentes sur la même échelle.



# Température cinétique et potentielle

Pour les chaînes les plus longues on a l'accord entre la température cinétique (lignes solides) et la température potentielle.

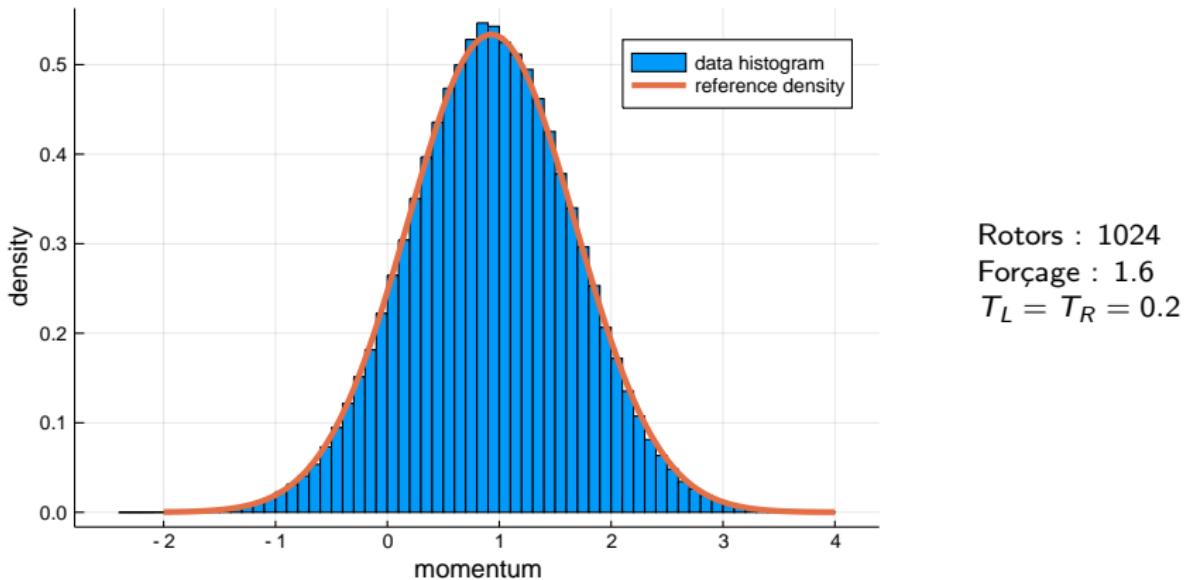


Cinétique :  
ligne solide

Potentielle :  
ligne pointillée

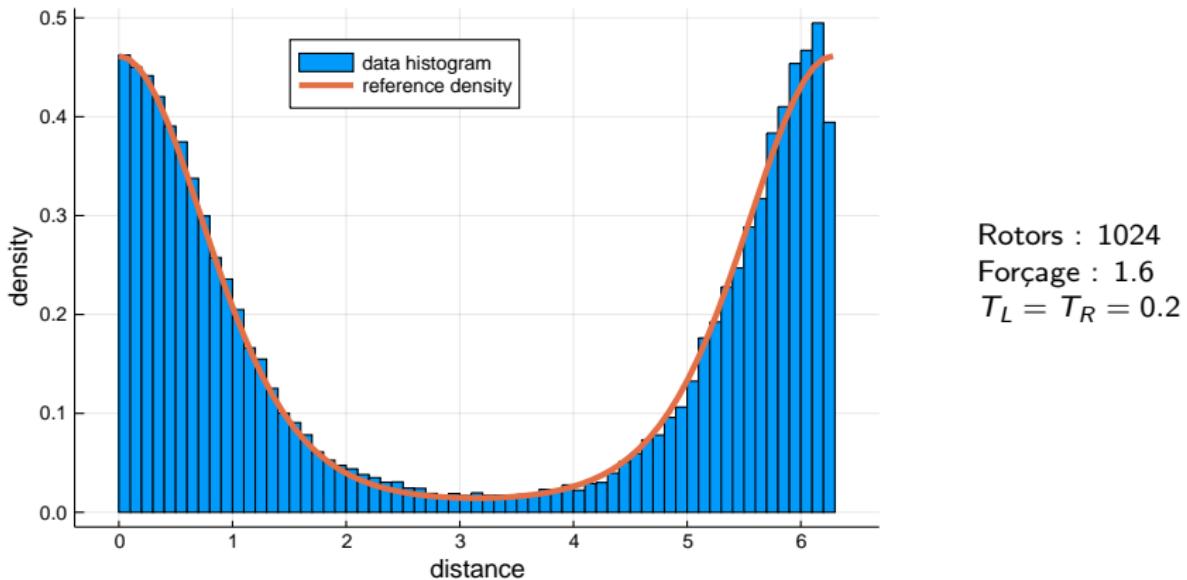
# Distribution de l'impulsion

Distribution empirique de l'impulsion du rotor le plus chaud, et la distribution de Gibbs :  $Z_{\text{kin}}^{-1} \exp[-(p - \bar{p}_i)^2 / (2T_i)]$ , où  $i$  est l'index du rotor le plus chaud et  $Z_{\text{kin}} = \sqrt{2\pi T_i}$ .



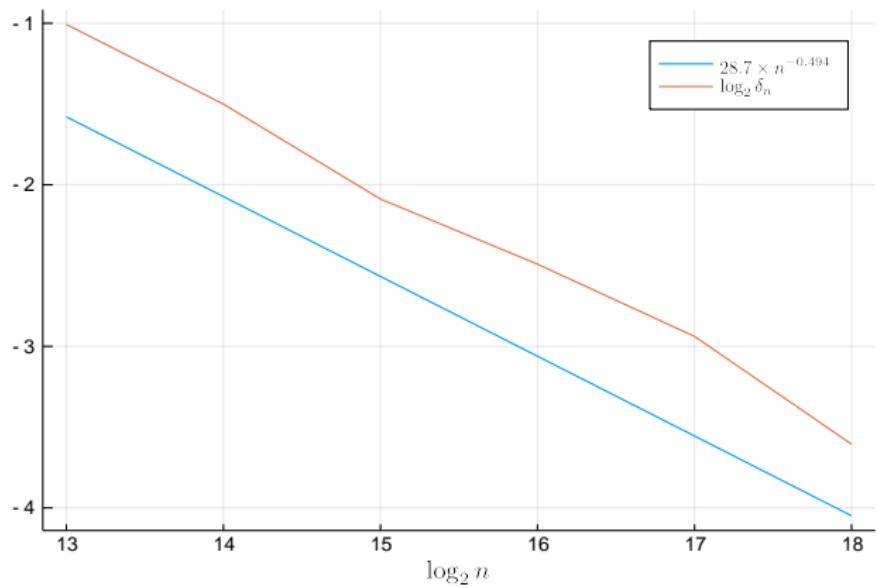
# Distribution de la distance

Distribution empirique de la distance du rotor le plus chaud (à son voisin), et la distribution de Gibbs :  $Z_{\text{pot}}^{-1} \exp[-V(r)/T_i]$ , où  $i$  est l'index du rotor le plus chaud.



# Indépendance des impulsions et distances

Décroissance de l'erreur par rapport au nombre d'échantillons entre la distribution jointe et le produit tensoriel des impulsions et des distances.  $\delta_n = \int_{[0,2\pi] \times \mathbb{R}} |\psi^n(r, p) - \bar{\psi}^n(r)\bar{\psi}^n(p)| dr dp.$

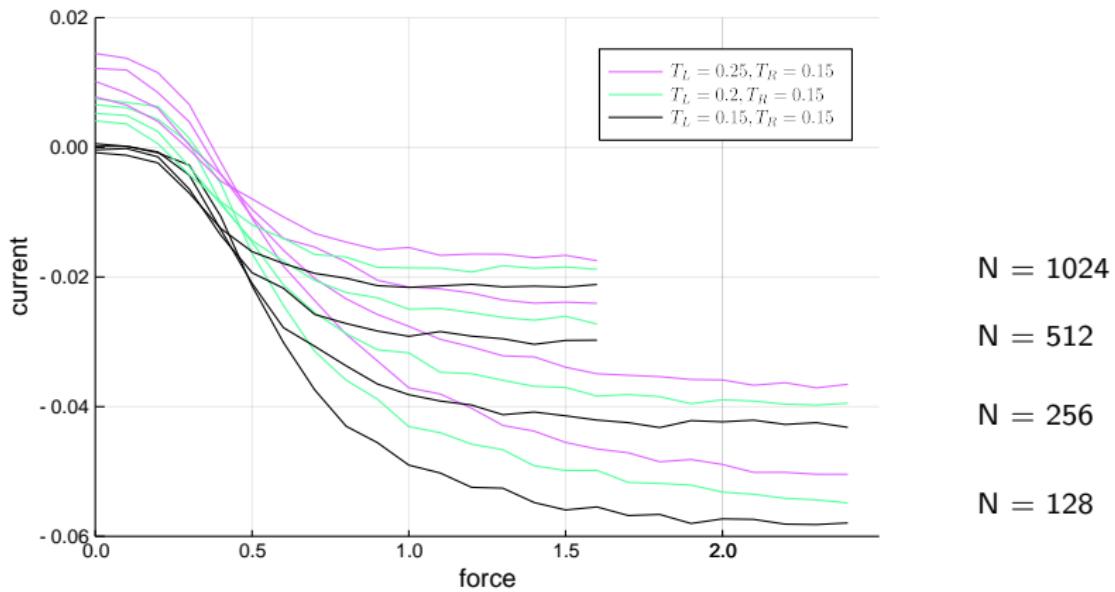


Rotors : 1024  
Forçage : 1.6  
 $T_L = T_R = 0.2$

Décroissement :  
 $\delta_n \approx 13 \times n^{-0.491}$

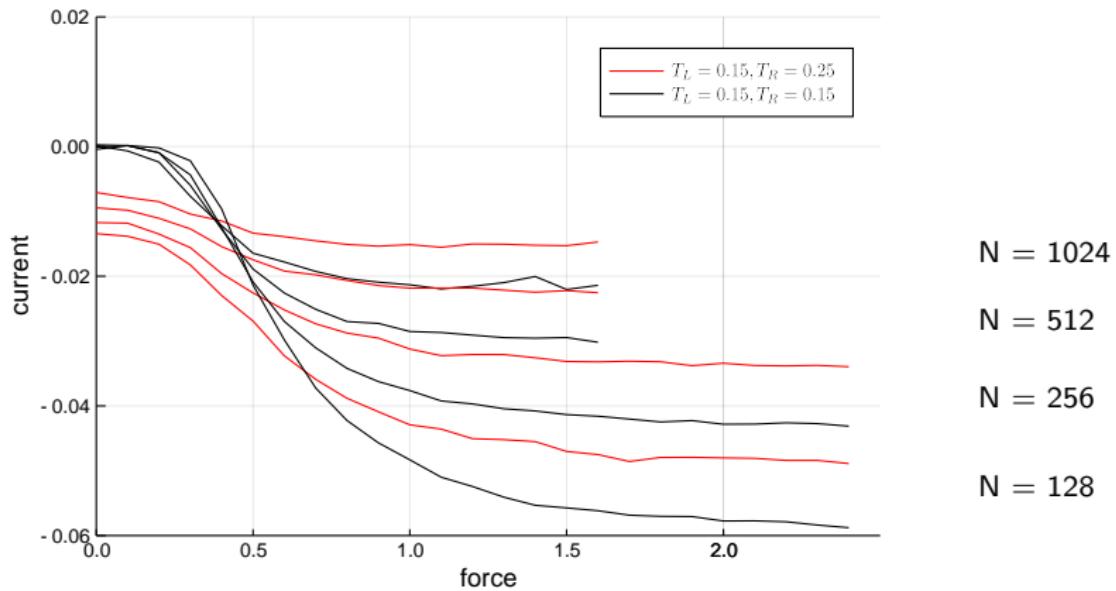
# Flux d'énergie normal

Le flux d'énergie par rapport au forçage pour des chaînes de longueurs différentes. La température à droite est 0.15. La couleur des courbes indique la température à gauche (0.15, 0.2, et 0.25).



# Flux d'énergie étrange

Ici, la réduction de la température à droite suscite une **augmentation** du courant vers la gauche. Une explication est que la réduction de température augmente la conductivité, et donc le forçage a davantage d'influence sur le système.



# Merci !

# Références I

- [1] Gabriel Stoltz. "Introduction à la physique statistique numérique". In: (2018). URL: [http://cermics.enpc.fr/%7Estoltz/Cours/intro\\_phys\\_stat.pdf](http://cermics.enpc.fr/%7Estoltz/Cours/intro_phys_stat.pdf).
- [2] Alessandra Iacobucci et al. "Negative thermal conductivity of chains of rotors with mechanical forcing". In: *Physical Review E* 84.6 (Dec. 2011). ISSN: 1550-2376. DOI: [10.1103/physreve.84.061108](https://doi.org/10.1103/physreve.84.061108). URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.84.061108>.
- [3] Shozo Takeno and Michel Peyrard. "Nonlinear modes in coupled rotator models". In: *Physica D: Nonlinear Phenomena* 92.3 (1996), pp. 140–163. ISSN: 0167-2789. DOI: [https://doi.org/10.1016/0167-2789\(95\)00284-7](https://doi.org/10.1016/0167-2789(95)00284-7). URL: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0167278995002847>.
- [4] Alessandra Iacobucci. "Nonequilibrium stationary states of rotor and oscillator chains". Theses. PSL Research University, Oct. 2017. URL: <https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-01792503>.
- [5] O. V. Gendelman and A. V. Savin. "Normal Heat Conductivity of the One-Dimensional Lattice with Periodic Potential of Nearest-Neighbor Interaction". In: *Phys. Rev. Lett.* 84 (11 Mar. 2000), pp. 2381–2384. DOI: [10.1103/PhysRevLett.84.2381](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.2381). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.84.2381>.
- [6] Julien Reyner. "La loi de Fourier : une introduction". In: (2012). URL: [http://cermics.enpc.fr/~reygnerj/fourier/intro\\_julien.pdf](http://cermics.enpc.fr/~reygnerj/fourier/intro_julien.pdf).

## Références II

- [7] Gabriel Stoltz. "Molecular Simulation: Nonequilibrium and Dynamical Problems". Manuscript en anglais. Habilitation à diriger des recherches. Université Paris-Est, June 2012. URL:  
<https://tel.archives-ouvertes.fr/tel-00709965>.
- [8] quantpie. "Ornstein Uhlenbeck (OU) Process: solution, mean, variance, covariance, calibration, and simulation". In: (2018). URL:  
<https://www.youtube.com/watch?v=XrNf2hNHM6I>.
- [9] quantpie. "Fokker Planck Equation Derivation: Local Volatility, Ornstein Uhlenbeck, and Geometric Brownian". In: (2019). URL:  
<https://www.youtube.com/watch?v=MmcgT6-1BoY>.