PRÉSENTATION DE L'ARTICLE *FOURIER'S LAW FOR A MICROSCOPIC MODEL OF HEAT CONDUCTION*, BERNARDIN ET OLLA, 2005

Ce document présente le modèle étudié, les résultats obtenus et les principales techniques employées dans l'article [2]. Tout commentaire est le bienvenu : julien.reygner@upmc.fr.

1. Présentation du modèle et des résultats

On considère une chaîne de $N-1$ atomes $x \in \{1, \dots, N-1\}$, repérés par leur moment $p_x \in \mathbb{R}$ et leur position $q_x \in \mathbb{R}$. L'évolution du processus $(p_x, q_x)_{1 \leq x \leq N-1}$ est déterminée par les trois effets suivants :

- la dynamique de base est hamiltonienne, sans potential d'accrochage, et avec un potentiel d'interaction harmonique ;
- les atomes 1 et $N-1$ sont en contact avec des thermostats modélisés par des processus d'Ornstein-Uhlenbeck ;
- chaque atome échange une partie aléatoire de son énergie cinétique avec ses voisins, de sorte que l'énergie cinétique totale n'est pas perturbée par ce bruit.

Comme il n'y a pas de potentiel d'accrochage, le système est invariant par translation et on code plutôt les positions des atomes par le vecteur $(r_x)_{1 \leq x \leq N-2}$ des écarts $r_x := q_{x+1} - q_x$. Le hamiltonien s'écrit alors

$$H_N = \sum_{x=1}^{N-1} e_x, \tag{1}$$

où e_x est l'énergie par particule

$$e_x = \frac{p_x^2 + r_x^2}{2}, \quad x \in \{1, \dots, N-2\}, \qquad e_{N-1} = \frac{p_{N-1}^2}{2}. \tag{2}$$

L'évolution globale du système est alors gouvernée par le système d'équations différentielles stochastiques

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}r_x &= (p_{x+1} - p_x)\mathrm{d}t, \quad x \in \{1, \dots, N-2\}, \\
\mathrm{d}p_x &= (r_x - r_{x-1})\mathrm{d}t - \gamma p_x \mathrm{d}t + \sqrt{\gamma}(p_{x-1}\mathrm{d}w_{x-1,x} - p_{x+1}\mathrm{d}w_{x,x+1}), \quad x \in \{2, \dots, N-2\}, \\
\mathrm{d}p_1 &= r_1 \mathrm{d}t - \frac{1+\gamma}{2} p_1 \mathrm{d}t - \sqrt{\gamma} p_2 \mathrm{d}w_{1,2} + \sqrt{T_\mathrm{l}}\mathrm{d}w_{0,1}, \\
\mathrm{d}p_{N-1} &= -r_{N-2}\mathrm{d}t - \frac{1+\gamma}{2} p_{N-1}\mathrm{d}t + \sqrt{\gamma} p_{N-2}\mathrm{d}w_{N-2,N-1} + \sqrt{T_\mathrm{r}}\mathrm{d}w_{N-1,N},
\end{aligned} \tag{3}$$

où les processus $w_{x,x+1}$, $x \in \{0, \dots, N-1\}$ sont des mouvement browniens standard indépendants. Les processus $w_{0,1}$ et $w_{N-1,N}$ dirigent l'échange d'énergie entre les atomes extrémaux et les thermostats, tandis que les processus $w_{x,x+1}$, $x \in \{1, \dots, N-2\}$, dirigent l'échange d'énergie entre les atomes x et $x+1$. Le paramètre $\gamma > 0$ est l'intensité du bruit. Le générateur infinitésimal s'écrit

$$\begin{aligned}
L_N = &\sum_{x=1}^{N-2} (p_{x+1} - p_x)\partial_{r_x} + \sum_{x=2}^{N-2} (r_x - r_{x-1})\partial_{p_x} + r_1 \partial_{p_1} - r_{N-2}\partial_{p_{N-2}} \\
&+ \frac{1}{2}(T_\mathrm{l}\partial_{p_1}^2 - p_1 \partial_{p_1}) + \frac{1}{2}(T_\mathrm{r}\partial_{p_{N-1}}^2 - p_{N-1}\partial_{p_{N-1}}) \\
&+ \frac{\gamma}{2} \sum_{x=1}^{N-2} X_{x,x+1}^2,
\end{aligned} \tag{4}$$

où $X_{x,x+1} = p_{x+1}\partial_{p_x} - p_x \partial_{p_{x+1}}$.

Date: Lundi 25 mars 2013.

Le bruit introduit ci-dessus est similaire au bruit introduit dans l'article de Basile, Bernardin et Olla [1] présenté par Marielle à la dernière séance. Ainsi les auteurs s'attendent-ils à ce que les résultats de l'article restent valables si ce bruit est remplacé par un échange total de l'énergie cinétique entre deux atomes voisins selon un processus de Poisson.

L'existence, l'unicité et la régularité de la mesure invariante associée au générateur L_N sont prouvées dans l'annexe de l'article [2], qui utilise en particulier un argument d'hypoellipticité que l'on ne détaille pas ici, mais cela pourrait faire l'objet d'un prochain exposé. Notons que lorsque $T_\mathrm{l} = T_\mathrm{r}$, $\langle\cdot\rangle$ est le produit de densités gaussiennes ; en-dehors de ce cas, on ne connaît pas d'expression de $\langle\cdot\rangle$.

Le flux local d'énergie de l'atome x vers l'atome $x+1$ est défini par

$$j_{x,x+1} = -r_x p_{x+1} - \frac{\gamma}{2}(p_{x+1}^2 - p_x^2), \quad x \in \{1,\dots,N-2\} \tag{5}$$

et le flux d'énergie entre les atomes extrémaux et les thermostats est défini par

$$j_{0,1} = \frac{1}{2}(T_\mathrm{l} - p_1^2), \qquad j_{N-1,N} = -\frac{1}{2}(T_\mathrm{r} - p_{N-1}^2). \tag{6}$$

La variation d'énergie de l'atome x correspond bien à la différence du flux d'énergie venant de l'atome $x-1$ et du flux d'énergie allant vers l'atome $x+1$:

$$L_N e_x = j_{x-1,x} - j_{x,x+1}, \quad x \in \{1,\dots,N-1\}. \tag{7}$$

Par stationnarité, $\langle L_N e_x\rangle = 0$ et ainsi le flux d'énergie moyen est constant le long de la chaîne :

$$\langle j_{0,1}\rangle = \langle j_{x,x+1}\rangle = \langle j_{N-1,N}\rangle =: j_N, \quad x \in \{1,\dots,N-2\}. \tag{8}$$

Les résultats de l'article concernent le comportement du système dans la limite thermodynamique $N \to +\infty$. Le Théorème 1 montre que j_N est d'ordre $1/N$:

$$\lim_{N\to+\infty} N j_N = \frac{1}{2}\left(\gamma + \frac{1}{\gamma}\right)(T_\mathrm{l} - T_\mathrm{r}). \tag{9}$$

En supposant un profil de température linéaire, le gradient local de température s'écrit $\nabla T = (T_\mathrm{r} - T_\mathrm{l})/N$ de sorte que le Théorème 1 exprime la loi de Fourier

$$j = -\kappa\nabla T, \qquad \kappa = \frac{1}{2}\left(\gamma + \frac{1}{\gamma}\right). \tag{10}$$

Le Théorème 2 montre que l'énergie totale du système est proportionnelle à la taille du système :

$$\forall\gamma > 0, \qquad \lim_{N\to+\infty} \frac{\langle H_N\rangle}{N} = \frac{1}{2}(T_\mathrm{l} + T_\mathrm{r}), \tag{11}$$

et le Théorème 3 établit que le profil d'énergie le long de la chaîne est linéaire : pour $\gamma = 1$ et pour toute fonction $G : [0,1] \to \mathbb{R}$ bornée,

$$\lim_{N\to+\infty} \left\langle \frac{1}{N}\sum_{x=1}^{N-1} G\left(\frac{x}{N}\right) e_x \right\rangle = \int_0^1 G(q)((1-q)T_\mathrm{l} + qT_\mathrm{r})\mathrm{d}q. \tag{12}$$

Pour prouver le Théorème 1, on commence par écrire une relation de fluctuation-dissipation pour le courant de l'énergie, ce qui permet de ramener (9) à un contrôle des moments d'ordre 2 des coordonnées des atomes 1, 2, $N-2$ et $N-1$. Ces contrôles sont obtenus d'une part grâce à des manipulations élémentaires sur le générateur infinitésimal, d'autre part en estimant la production d'entropie de la dynamique à l'intérieur de la chaîne. On détaille l'intégralité de ces calculs dans la Section 2. Dans la Section 3, on indique seulement les outils nécessaires pour établir les Théorèmes 2 et 3. On conclut par quelques remarques dans la Section 4.

2. Loi de Fourier

On peut vouloir attaquer la preuve de (9) en écrivant que j_N est le flux moyen d'énergie entre un thermostat et l'atome extrémal correspondant, par exemple $j_N = \langle j_{0,1}\rangle = (T_l - \langle p_1^2\rangle)/2$. Il suffit alors de contrôler le moment du second ordre $\langle p_1^2\rangle$ pour prouver (9). On peut obtenir une expression de $\langle p_1^2\rangle$ en appliquant le générateur infinitésimal L_N au produit $r_1 p_1$, ce qui donne

$$L_N(r_1p_1) = p_1(p_2 - p_1) + r_1^2 - \frac{\gamma+1}{2}p_1r_1, \tag{13}$$

d'où

$$\langle p_1^2\rangle = \langle r_1^2\rangle + \langle p_1p_2\rangle - \frac{\gamma+1}{2}\langle p_1r_1\rangle. \tag{14}$$

Cette dernière relation fait apparaître des quantités liées à l'atome 2, et ainsi de proche en proche. On ne peut donc pas espérer se contenter d'une description locale du flux à une extrémité pour obtenir (9). L'écriture d'une relation de *fluctuation-dissipation* permet néanmoins de n'exprimer le flux total d'énergie moyen qu'en fonction du flux aux deux extrémités.

2.1. Relation de fluctuation-dissipation.

Généralement, une relation de fluctuation-dissipation est l'expression du courant instantané d'une quantité conservée comme la somme d'un terme de fluctuation (une dérivée temporelle) et d'un terme de dissipation (un gradient spatial). Ici, la forme très particulière du bruit considéré permet l'écriture exacte d'une telle relation :

$$j_{x,x+1} = -\nabla w_x + L_N h_x, \qquad x \in \{1,\dots,N-3\}, \tag{15}$$

où $\nabla w_x := w_{x+1} - w_x$ est le gradient discret le long de la chaîne, et

$$w_x := \frac{1}{2\gamma}r_x^2 + \frac{\gamma}{2}p_x^2 + \frac{1}{2\gamma}p_xp_{x+1} + \frac{\gamma}{4}(p_{x+1}^2 - p_x^2), \qquad h_x := \frac{1}{2\gamma}p_{x+1}(r_x + r_{x+1}) + \frac{1}{4}p_{x+1}^2. \tag{16}$$

On en déduit la relation suivante

$$\begin{aligned} j_N &= \frac{1}{N-3}\sum_{x=1}^{N-3}\langle j_{x,x+1}\rangle = -\frac{1}{N-3}\sum_{x=1}^{N-3}\langle w_{x+1}\rangle - \langle w_x\rangle \\ &= -\frac{1}{N-3}\Big(\frac{1}{2\gamma}\langle r_{N-2}^2\rangle + \frac{\gamma}{2}\langle p_{N-2}^2\rangle + \frac{1}{2\gamma}\langle p_{N-2}p_{N-1}\rangle + \frac{\gamma}{4}\langle p_{N-1}^2 - p_{N-2}^2\rangle \\ &\quad - \frac{1}{2\gamma}\langle r_1^2\rangle - \frac{\gamma}{2}\langle p_1^2\rangle - \frac{1}{2\gamma}\langle p_1p_2\rangle - \frac{\gamma}{4}\langle p_2^2 - p_1^2\rangle\Big), \end{aligned} \tag{17}$$

qui est celle à partir de laquelle on va travailler pour obtenir (9). Notons que, par rapport aux expressions de j_N données par exemple par $\langle j_{0,1}\rangle$ ou $\langle j_{N-1,N}\rangle$, on a gagné un facteur d'ordre $1/N$ ici. Tout l'enjeu réside désormais dans le contrôle des moments d'ordre 2 ou des moments croisés des positions et vitesses des atomes 1, 2, $N-2$, $N-1$. On commence par montrer, par des manipulations élémentaires sur le générateur infinitésimal, que tous ces moments sont bornés lorsque $N \to +\infty$.

2.2. Contrôles élémentaires.

On montre dans ce paragraphe que tous les moments d'ordre 2 présents au membre de droite de (17) sont bornés, ce qui constitue le Lemme 1 de [2] : il existe $C > 0$ ne dépendant pas de N tel que

$$\langle r_1^2\rangle + \langle p_1^2\rangle + \langle p_2^2\rangle + \langle r_{N-2}^2\rangle + \langle p_{N-2}^2\rangle + \langle p_{N-1}^2\rangle \le C. \tag{18}$$

Remarquons qu'en vertu de l'inégalité de Schwarz[1] $|ab| \le (a^2+b^2)/2$, le résultat ci-dessus implique également que les moments croisés $\langle p_1p_2\rangle$ et $\langle p_{N-2}p_{N-1}\rangle$ sont bornés. En conséquence, j_N est au plus de l'ordre de $1/N$. Avant de préciser le comportement de j_N lorsque $N \to +\infty$, expliquons comment obtenir (18).

Contrôle de $\langle p_1^2\rangle$ et $\langle p_{N-1}^2\rangle$. D'après (6) et (8), $\langle p_1^2\rangle + \langle p_{N-1}^2\rangle = T_l + T_r$.

Contrôle de $\langle p_2^2\rangle$ et $\langle p_{N-2}^2\rangle$. D'après (5), (8) et (6), il vient

$$-\langle r_1p_2\rangle - \frac{\gamma}{2}(\langle p_2^2\rangle - \langle p_1^2\rangle) = \langle j_{1,2}\rangle = \langle j_{0,1}\rangle = \frac{1}{2}(T_l - \langle p_1^2\rangle), \tag{19}$$

1. Les auteurs appellent cette inégalité *inégalité de Schwarz*, je la connais plutôt sous le nom d'*inégalité de Young*.

d'où

$$\frac{\gamma}{2}\left\langle p_2^2\right\rangle = -\left\langle r_1 p_2\right\rangle + \frac{1+\gamma}{2}\left\langle p_1^2\right\rangle - \frac{1}{2}T_{\mathrm{l}}. \tag{20}$$

En appliquant L_N à r_1^2, il vient $L_N r_1^2 = 2(r_1p_2 - r_1p_1)$ d'où $\langle r_1p_2\rangle = \langle r_1p_1\rangle$, ce qui donne

$$\frac{\gamma}{2}\left\langle p_2^2\right\rangle = -\left\langle r_1 p_1\right\rangle + \frac{1+\gamma}{2}\left\langle p_1^2\right\rangle - \frac{1}{2}T_{\mathrm{l}}. \tag{21}$$

D'après l'inégalité de Schwarz, on en déduit qu'il existe $C > 0$ tel que $\left\langle p_2^2\right\rangle \le C(\left\langle r_1^2\right\rangle + \left\langle p_1^2\right\rangle)$. Des calculs similaires donnent $\left\langle p_{N-2}^2\right\rangle \le C(\left\langle r_{N-2}^2\right\rangle + \left\langle p_{N-1}^2\right\rangle)$. L'inégalité (18) est vraie si l'on montre maintenant que la quantité $\left\langle r_1^2\right\rangle + \left\langle r_{N-1}^2\right\rangle$ est bornée.

Contrôle de $\left\langle r_1^2\right\rangle$ *et* $\left\langle r_{N-1}^2\right\rangle$. Rappelons que d'après (14),

$$\left\langle r_1^2\right\rangle = \left\langle p_1^2\right\rangle - \left\langle p_1p_2\right\rangle + \frac{\gamma+1}{2}\left\langle p_1 r_1\right\rangle, \tag{22}$$

puis d'après (21),

$$\begin{aligned}\left\langle r_1^2\right\rangle &= \left\langle p_1^2\right\rangle - \left\langle p_1p_2\right\rangle + \frac{\gamma+1}{2}\left(-\frac{\gamma}{2}\left\langle p_2^2\right\rangle + \frac{1+\gamma}{2}\left\langle p_1^2\right\rangle - \frac{1}{2}T_{\mathrm{l}}\right)\\ &\le \left(1 + \frac{1}{2\alpha} + \frac{(1+\gamma)^2}{4}\right)\left\langle p_1^2\right\rangle + \left(\frac{\alpha}{2} - \frac{\gamma(\gamma+1)}{4}\right)\left\langle p_2^2\right\rangle,\end{aligned} \tag{23}$$

pour tout $\alpha > 0$, la dernière ligne étant une conséquence de l'inégalité de Schwarz. En prenant α tel que le coefficient devant $\left\langle p_2^2\right\rangle$ s'annule, on obtient $\left\langle r_1^2\right\rangle \le C\left\langle p_1^2\right\rangle$ et des calculs similaires donnent $\left\langle r_{N-2}^2\right\rangle \le C\left\langle p_{N-1}^2\right\rangle$.

L'inégalité (18), obtenue de manière élémentaire, donne l'ordre de grandeur de j_N, mais n'indique pas la valeur de la limite de Nj_N. On peut déjà remarquer qu'elle implique

$$\lim_{N\to+\infty}\left\langle p_1^2\right\rangle = T_{\mathrm{l}}, \qquad \lim_{N\to+\infty}\left\langle p_{N-1}^2\right\rangle = T_{\mathrm{r}}, \tag{24}$$

puisque j_N tend vers 0. Admettons momentanément les énoncés suivants :

$$\begin{aligned}&\lim_{N\to+\infty}\left\langle p_1p_2\right\rangle = 0, &&\lim_{N\to+\infty}\left\langle p_{N-2}p_{N-1}\right\rangle = 0,\\ &\lim_{N\to+\infty}\left\langle r_1p_2\right\rangle = 0, &&\lim_{N\to+\infty}\left\langle r_{N-2}p_{N-1}\right\rangle = 0,\end{aligned} \tag{25}$$

qui constituent la Proposition 1 de [2]. Alors d'après (14) et l'égalité $\langle r_1p_1\rangle = \langle r_1p_2\rangle$, on en déduit

$$\lim_{N\to+\infty}\left\langle r_1^2\right\rangle = \lim_{N\to+\infty}\left\langle p_1^2\right\rangle = T_{\mathrm{l}}, \tag{26}$$

et, de manière similaire,

$$\lim_{N\to+\infty}\left\langle r_{N-2}^2\right\rangle = \lim_{N\to+\infty}\left\langle p_{N-1}^2\right\rangle = T_{\mathrm{r}}. \tag{27}$$

Par ailleurs, puisque $\langle j_{1,2}\rangle$ et $\langle r_1p_2\rangle$ tendent vers 0,

$$\lim_{N\to+\infty}\left\langle p_2^2\right\rangle - \left\langle p_1^2\right\rangle = 0, \tag{28}$$

et, de manière similaire,

$$\lim_{N\to+\infty}\left\langle p_{N-1}^2\right\rangle - \left\langle p_{N-2}^2\right\rangle = 0. \tag{29}$$

La limite de tous les termes à l'intérieur de la parenthèse du membre de droite dans (17) est maintenant connue, et on en déduit (9).

2.3. **Contrôle de la production d'entropie.** Il reste désormais à prouver (25). Ces identités ne proviennent pas de manipulations élémentaires comme au paragraphe précédent, mais d'une estimation de la production d'entropie de la dynamique à l'intérieur de la chaîne.

Pour tout $T > 0$, notons $g_T(p_1, r_1, \ldots, p_{N-2}, r_{N-2}, p_{N-1})$ la densité du produit de gaussiennes centrées, de variance T. On note f_N la densité de $\langle\cdot\rangle$ par rapport à g_{T_r} ; par hypoellipticité, cette densité existe et est régulière. En utilisant la stationnarité et le fait que g_T est invariante pour la dynamique hamiltonienne, on écrit

$$\begin{aligned} 0 = -2\langle L_N \log f_N\rangle &= \gamma \sum_{x=1}^{N-2} \int \frac{(X_{x,x+1} f_N)^2}{f_N} g_{T_\mathrm{r}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} \\ &\quad + T_\mathrm{r} \int \frac{(\partial_{p_{N-1}} f_N)^2}{f_N} g_{T_\mathrm{r}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} - 2\langle L_\mathrm{l} \log f_N\rangle, \end{aligned} \tag{30}$$

où $L_\mathrm{l} = (T_\mathrm{l}\partial_{p_1}^2 - p_1\partial_{p_1})$. Notons $h = g_{T_\mathrm{l}}/g_{T_\mathrm{r}}$, alors

$$\begin{aligned} \langle L_\mathrm{l}\log(f_N)\rangle &= \langle L_\mathrm{l}\log(f_N/h)\rangle + \langle L_\mathrm{l}\log(h)\rangle \\ &= \int L_\mathrm{l}\log(f_N/h) f_N g_{T_\mathrm{r}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} + \int L_\mathrm{l}\log(h) f_N g_{T_\mathrm{r}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} \\ &= \int L_\mathrm{l}\log(f_N/h) \frac{f_N}{h} g_{T_\mathrm{l}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} + \int L_\mathrm{l}\log(h) f_N g_{T_\mathrm{r}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r}. \end{aligned} \tag{31}$$

D'une part,

$$L_\mathrm{l}\log(f_N/h) = \left(T_\mathrm{l}\frac{\partial_{p_1}^2(f_N/h)}{f_N/h} - p_1\frac{\partial_{p_1}(f_N/h)}{f_N/h} - T_\mathrm{l}\frac{(\partial_{p_1}(f_N/h))^2}{(f_N/h)^2}\right), \tag{32}$$

donc

$$\begin{aligned} \int L_\mathrm{l}\log(f_N/h)\frac{f_N}{h} g_{T_\mathrm{l}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} &= \int \left(T_\mathrm{l}\partial_{p_1}^2(f_N/h) - p_1\partial_{p_1}(f_N/h)\right) g_{T_\mathrm{l}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} \\ &\quad - T_\mathrm{l}\int \frac{(\partial_{p_1}(f_N/h))^2}{f_N/h} g_{T_\mathrm{l}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r}, \end{aligned} \tag{33}$$

et la première intégrale du terme de droite ci-dessus s'annule car la mesure de densité g_{T_l} est invariante pour le générateur d'Ornstein-Uhlenbeck $T_\mathrm{l}\partial_{p_1}^2 - p_1\partial_{p_1}$ [il me manque un facteur 2...]. D'autre part, en utilisant l'expression explicite de h, on écrit

$$L_\mathrm{l}\log(h) = -2T_\mathrm{l}(T_\mathrm{l}^{-1} - T_\mathrm{r}^{-1}) + 2p_1^2(T_\mathrm{l}^{-1} - T_\mathrm{r}^{-1}), \tag{34}$$

d'où

$$\int L_\mathrm{l}\log(h) f_N g_{T_\mathrm{r}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} = -2(T_\mathrm{l}^{-1} - T_\mathrm{r}^{-1})(T_\mathrm{l} - \langle p_1^2\rangle) = -4(T_\mathrm{l}^{-1} - T_\mathrm{r}^{-1}) j_N. \tag{35}$$

On en conclut l'identité

$$\begin{aligned} 2(T_\mathrm{r}^{-1} - T_\mathrm{l}^{-1}) j_N &= \gamma \sum_{x=1}^{N-2} \int \frac{(X_{x,x+1} f_N)^2}{f_N} g_{T_\mathrm{r}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} \\ &\quad + T_\mathrm{r}\int \frac{(\partial_{p_{N-1}} f_N)^2}{f_N} g_{T_\mathrm{r}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} + T_\mathrm{l}\int \frac{(\partial_{p_1}(f_N/h))^2}{f_N/h} g_{T_\mathrm{l}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r}, \end{aligned} \tag{36}$$

dont on remarque que tous les termes de droite sont positifs. Cela donne déjà le signe de la loi de Fourier : si $T_\mathrm{l} > T_\mathrm{r}$, $j_N > 0$. De plus, le terme de gauche tend vers 0 lorsque $N \to +\infty$, tandis que le terme de droite s'écrit comme la somme de la production d'entropie de la dynamique intérieure (du bruit) et des atomes extrémaux.

Montrons maintenant comment cette égalité permet d'obtenir les estimations (25). On n'explique que la limite de $\langle r_1 p_2\rangle$, les autres limites se traitent de manière similaire. Rappelons que $\langle r_1 p_2\rangle = \langle r_1 p_1\rangle$, puis, en utilisant l'invariance de g_{T_l} pour le générateur $T_\mathrm{l}\partial_{p_1}^2 - p_1\partial_{p_1}$,

$$\langle r_1 p_1\rangle = \int r_1 p_1 f_N g_{T_\mathrm{r}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} = \int r_1 p_1 \frac{f_N}{h} g_{T_\mathrm{l}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} = T_\mathrm{l}\int r_1 \partial_{p_1}(f_N/h) g_{T_\mathrm{l}} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r}. \tag{37}$$

D'après l'inégalité de Cauchy-Schwarz,

$$T_l \int r_1 \partial_{p_1}(f_N/h) g_{T_l} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} \leq T_l \left\langle r_1^2 \right\rangle^{1/2} \left(\int \frac{(\partial_{p_1}(f_N/h))^2}{f_N/h} g_{T_l} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} \right)^{1/2}. \tag{38}$$

D'une part, d'après (18), $\left\langle r_1^2 \right\rangle \leq C$. D'autre part, d'après (36),

$$\int \frac{(\partial_{p_1}(f_N/h))^2}{f_N/h} g_{T_l} \mathrm{d}\bar{p}\mathrm{d}\bar{r} \leq 2(T_{\mathrm{r}}^{-1} - T_l^{-1}) j_N, \tag{39}$$

ce qui conclut la preuve du Théorème 1.

3. Profil d'énergie

On s'intéresse maintenant aux Théorèmes 2 et 3 de [2]. Le premier résultat dans cette direction est l'équipartition de l'énergie :

$$\left\langle \sum_{x=1}^{N-1} p_x^2 \right\rangle = \left\langle \sum_{x=1}^{N-2} r_x^2 \right\rangle. \tag{40}$$

La preuve de cette égalité est élémentaire et découle des deux égalités suivantes :

$$\begin{aligned} &L_N \left(\sum_{x=1}^{N-1} q_x p_x \right) = \sum_{x=1}^{N-1} p_x^2 - \sum_{x=1}^{N-2} r_x^2 - \gamma \sum_{x=2}^{N-2} q_x p_x - \frac{1+\gamma}{2}(q_1 p_1 + q_{N-1} p_{N-1}), \\ &L_N q_x^2 = 2 q_x p_x, \end{aligned} \tag{41}$$

où l'on rappelle que $r_x = q_{x+1} - q_x$.

Soit désormais

$$\phi(x) = \frac{1}{2\gamma} \left\langle r_x^2 \right\rangle + \frac{\gamma}{4}(\left\langle p_x^2 \right\rangle + \left\langle p_{x+1}^2 \right\rangle) + \frac{1}{2\gamma} \left\langle p_x p_{x+1} \right\rangle. \tag{42}$$

Notons que $\phi(x) = \langle w_x \rangle - (\gamma/4) \left\langle \nabla p_x^2 \right\rangle$, où w_x a été introduit dans l'écriture de la relation de fluctuation-dissipation (15). La fonction ϕ est donc harmonique :

$$\Delta\phi(x) = 0, \qquad x \in \{2, \ldots, N-3\}, \tag{43}$$

où $\Delta\phi(x) := \phi(x+1) + \phi(x-1) - 2\phi(x)$ est le laplacien discret le long de la chaîne. D'après le principe du maximum, ϕ est bornée par sa valeur au bord de la chaîne, et d'après les contrôles obtenus en (18), ϕ est bornée uniformément en N. De plus, un calcul explicite donne

$$\lim_{N\to+\infty} \frac{1}{N} \sum_{x=1}^{N-2} \phi(x) = \frac{1}{2}\left(\gamma + \frac{1}{\gamma}\right)(T_l + T_{\mathrm{r}}). \tag{44}$$

La suite de la preuve des Théorèmes 2 et 3 provient maintenant de calculs élémentaires que nous ne détaillons pas ici.

4. Commentaires

En dehors des contrôles élémentaires sur les moments d'ordre 2 des coordonnées des atomes extrémaux dans l'espace des phases, les deux principaux outils utilisés ici pour prouver la loi de Fourier sont la relation de fluctuation-dissipation (15) et le contrôle de la production d'entropie (36). On peut retrouver l'emploi de cette dernière technique dans les articles de Eyink, Lebowitz et Spohn [3] et Kipnis, Landim et Olla [4] pour établir des propriétés macroscopiques de modèles de *lattice gas*.

Par ailleurs, la preuve présentée peut s'adapter à des modèles proches de celui étudié ici : on peut par exemple ajouter un potentiel d'accrochage harmonique, ou mettre chaque atome en contact avec un thermostat. De plus, obtenir un contrôle similaire à (18) d'ordre $2+\delta$ pour $\delta > 0$ permettrait, en utilisant la méthode d'entropie relative, de prouver que le profil de *température* est linéaire, c'est-à-dire

$$\lim_{N\to+\infty} \left\langle \frac{1}{N} \sum_{x=1}^{N-1} G\left(\frac{x}{N}\right) p_x^2 \right\rangle = \int_0^1 G(q)((1-q)T_l + qT_{\mathrm{r}})\mathrm{d}q, \tag{45}$$

et que, pour tout $\gamma > 0$, le modèle est à l'équilibre local sous la mesure invariante, c'est-à-dire que, lorsque $N \to +\infty$, $\langle\cdot\rangle$ est le produit de gaussiennes centrées, de variance $T_x = (1 - x/N)T_\mathrm{l} + (x/N)T_\mathrm{r}$.

Références

[1] Giada Basile, Cédric Bernardin et Stefano Olla : Thermal conductivity for a momentum conservative model. *Comm. Math. Phys.*, 287(1):67–98, 2009.

[2] Cédric Bernardin et Stefano Olla : Fourier's law for a microscopic model of heat conduction. *J. Stat. Phys.*, 121(3-4):271–289, 2005.

[3] Gregory Eyink, Joel L. Lebowitz et Herbert Spohn : Hydrodynamics of stationary nonequilibrium states for some stochastic lattice gas models. *Comm. Math. Phys.*, 132(1):253–283, 1990.

[4] C. Kipnis, C. Landim et S. Olla : Macroscopic properties of a stationary non-equilibrium distribution for a non-gradient interacting particle system. *Ann. Inst. H. Poincaré Probab. Statist.*, 31(1):191–221, 1995.