Review of *Thermal conductivity for a momentum conservative model*

Marielle Simon

La dérivation de la loi de Fourier pour la conduction de la chaleur reste un problème totalement irrésolu. Pour étudier certains comportements diffusifs (tels qu'illustrés par la loi de Fourier), l'état initial du système que l'on considère est supposé proche de l'équilibre. L'objectif est de comprendre, du point de vue de la dynamique microscopique, les phénomènes de transport qui apparaissent. Il existe actuellement une théorie, physiquement assez satisfaisante, qui repose sur la formule de réponse linéaire donnée par Green-Kubo. Cette formule se déduit d'un développement au premier ordre de la perturbation, sans aucune justification mathématique rigoureuse.

1 Quelques rappels sur la conductivité thermique

1.1 Plusieurs définitions

Loi de Fourier. La loi de Fourier est observée expérimentalement dans deux grands types de situation :

1. Considérons un système macroscopique isolé (n'autorisant aucun échange de chaleur avec l'extérieur), décrit par un profil de température initial non uniforme $T_0(r)$. À $t > 0$, la température évolue, et la densité d'énergie à l'intérieur du système satisfait l'équation de conservation :
$$c(T)\frac{\partial T(r,t)}{\partial t} = -\nabla \cdot [\kappa(T)\nabla T] = -\nabla J \tag{1}$$
où $c(T)$ est la capacité calorifique [1]. La condition initiale est naturellement : $T(r,0) = T_0(r)$. On suppose qu'il n'y a aucun transport de masse, aucune variation de pression, et aucun échange de chaleur avec l'extérieur (on peut imaginer que notre système est un tore, c'est-à-dire que les conditions au bord sont périodiques).
Dans ce cas, l'état stationnaire, atteint à la limite $t \to \infty$, est donné par une température uniforme T^*.
2. Considérons le même système, désormais en contact avec des sources de chaleur : en chaque point du bord α, la température est maintenue égale à T_α. Lorsque le système atteint un état stationnaire, sa température $\tilde{T}(r)$ est solution de l'équation :
$$\nabla \cdot [\kappa(T)\tilde{T}(r)] = 0 \tag{2}$$
avec condition au bord $\tilde{T}(\alpha) = T_\alpha$.

Définition 1.1. *Dans chacune de ces situations, $\kappa(T)$ est appelée* conductivité thermique *du système.*

D'un point de vue physique, ces deux situations sont très similaires : en effet, à chaque fois, nous supposons que le système est complètement décrit par sa température $T(r,t)$. Au niveau microscopique, cela revient à dire que nous imaginons le système en *équilibre thermique local*. Plus précisément, nous divisons le système en une infinité de petites “boîtes”, la taille de chacune de ces boîtes étant petite devant la taille macrocopique du système, mais suffisamment grande pour contenir une infinité d'atomes. Nous supposons que chacune de ces boîtes, au temps t, est en équilibre, et que sa température est constante, donnée par $T(r_i,t)$, où r_i est le centre de la i-ième boîte. Lorsque les variations en temps et en espace sont faibles, nous pouvons alors utiliser une description continue de la température : $T(r,t)$.

1. Grandeur permettant de quantifier la possibilité qu'à un corps d'absorber ou restituer de l'énergie par échange thermique au cours d'une transformation pendant laquelle sa température varie. La capacité thermique est l'énergie qu'il faut apporter à un corps pour augmenter sa température d'un kelvin. Elle s'exprime en joule par kelvin (J/K). C'est une grandeur extensive : plus la quantité de matière est importante plus la capacité thermique est grande.

Cette hypothèse est physiquement très raisonnable, mais encore loin d'être complètement bien comprise d'un point de vue mathématique. Néanmoins, elle prend tout son sens lorsque l'on parle *limite hydrodynamique*.

On peut définir la notion de *conductivité thermique* sans invoquer l'équilibre local. Prenons l'exemple d'une barre verticale conductrice, de hauteur L. Les deux extrémités de la barre sont maintenues à deux températures différentes, T_1 et T_2. On note $\Delta T = T_1 - T_2$. On peut alors montrer [3] qu'il existe une unique mesure stationnaire hors-équilibre [2], notée μ_{ss}. On définit la conductivité thermique de la manière suivante :

$$\kappa(T) := \lim_{L\to\infty} \lim_{\Delta T\to 0} \kappa_L \qquad \text{où } \kappa_L := \frac{\langle J\rangle_{\mu_{ss}}}{\Delta T/L} = \frac{\text{“flux d'énergie moyen”}}{\text{“gradient moyen de température”}} \tag{3}$$

Théorie de la réponse linéaire et formule de Green-Kubo. La théorie de la réponse linéaire étudie le comportement du système lorsque celui-ci est légèrement perturbé. Le système est initialement à l'équilibre, ou dans un état stationnaire ρ, et est soumis à une petite perturbation X. En première approximation, la variation $\delta\rho$ est supposée linéaire en la perturbation X. C'est cette linéarisation qui permet d'obtenir la formule de Green-Kubo.

On reprend la situation précédente : on fixe deux températures distinctes aux extrémités d'une barre verticale. On veut comparer la mesure stationnaire μ_{ss} à la mesure d'équilibre μ_T, qui est la mesure invariante du système lorsque $T_1 = T_2 = T$.

On pose f_{ss} la densité de la mesure μ_{ss} par rapport à la mesure μ_T, et on suppose que l'on peut écrire un développement à l'ordre 1 en ΔT de cette densité :

$$f_{ss} = 1 + \Delta T \cdot u + o(\Delta T) \tag{4}$$

où u est une fonction à déterminer. Formellement, on peut donc écrire

$$\langle J\rangle_{ss} = \Delta T \cdot \int (Ju)\, d\mu_T + o(\Delta T) \tag{5}$$

Définition 1.2. *La* conductivité thermique de Green-Kubo *est donnée par :*

$$\kappa_{GK} := \lim_{L\to\infty} L \cdot \int (Ju)\, d\mu_T \tag{6}$$

Autrement dit, on n'a gardé que le coefficient d'ordre 1 dans le développement limité en ΔT du courant moyen $\langle J\rangle_{ss}$. Cette formule peut se réécrire de plusieurs manières différentes (nous en verrons quelques-unes par la suite).

Difficultés et obstacles mathématiques. La première difficulté mathématique consiste à prouver que le système reste bien en équilibre local lorsque $t > 0$. Pour cela, il faut que le système possède de très fortes propriétés d'ergodicité [3]. Malheureusement, on ne sait pas le prouver pour des systèmes purement hamiltoniens. On s'attend à ce que l'ergodicité apparaisse quand la taille du système devient de plus en plus grande.

Aujourd'hui, il existe très peu de résultats sur la finitude de la conductivité thermique pour des systèmes déterministes : seulement quelques cas particuliers ont été rigoureusement prouvés (par exemple, le gaz périodique de Lorentz, ou billard de Sinai, voir [7] et [12]). Dans les autres cas, on doit ajouter une dynamique stochastique à la dynamique hamiltonienne pour pouvoir prouver l'ergodicité du système (voir [9]).

L'existence de la conductivité thermique définie par la formule de Green-Kubo est un problème mathématique difficile, souvent irrésolu. Nous verrons par la suite que la formule de Green-Kubo fait apparaître des corrélations “courant-courant” :

$$\langle j_{x,x+1}(t) j_{0,1}(0)\rangle_T \tag{7}$$

2. Ce n'est pas une mesure d'équilibre, car il y a un courant d'énergie constant entre les deux extrémités.

3. Autrement dit, que les seules mesures invariantes par rapport au temps, et absolument continues par rapport à la mesure de Lebesgue, sont les mesures de Gibbs. Voir [8] et [14].

On aimerait avoir une bonne estimation de la décroissance en temps de ces corrélations. Lorsque la dynamique est purement déterministe, ce contrôle est extrêmement difficile à obtenir, voire impossible.

Dans certains modèles, la formule de Green-Kubo diverge. C'est le cas par exemple des systèmes dont l'énergie "super-diffuse", autrement dit, lorsque les fluctuations du courant évoluent dans une échelle de temps plus courte que l'échelle diffusive (les corrélations courant-courant ne décroissent pas suffisamment vite).

Ce qui a déjà été étudié.

1. **Cas des systèmes harmoniques perturbés par un bruit stochastique.** Lorsque la dynamique ne conserve pas le moment, trois articles montrent que la conductivité thermique (au sens de la loi de Fourier) est finie :
   - Bernardin et Olla [2] considèrent un modèle dans lequel seulement l'énergie est conservée.
   - Bonetto, Lebowitz, Lukkarinen [6] étudient un système *non conservatif* : l'énergie totale n'est pas conservée seule l'énergie *moyenne* est conservée. Ils prouvent également que les deux définitions de la conductivité thermique coïncident.
   - Bernardin [5] prouve la finitude de la conductivité dans le cas harmonique désordonné (les masses des particules ne sont plus uniformément égales).
2. **Cas des systèmes harmoniques purement déterministes.** Quelque soit la dimension, on s'attend à ce que la conductivité thermique soit toujours infinie [11] (ceci est dû à la linéarité du système).
3. **Dynamiques qui conservent le moment.** Dans certains modèles en dimension 1, lorsque le moment total est conservé (en plus de l'énergie), des simulations numériques illustrent la divergence de la conductivité thermique [13]. Plus précisément, les quantités (7) ne décroissent pas suffisamment vite avec le temps.

Pour en savoir plus.

1. **Sur la dérivation de la formule de Green-Kubo.**
   - Cas d'un système avec thermostats aux bords : [4] et [3], chapitre 6.
     $\Rightarrow$ Théorie de la réponse linéaire.
   - Ajout d'une énergie positive en 0 : [3], chapitre 5.
     $\Rightarrow$ Utilisation de la loi de Fourier.
2. **Sur les différentes formules de Green-Kubo.** Dans [10], Landim et al. proposent trois définitions de la diffusivité, et étudient le lien entre elles.

2 Modèle étudié

On étudie d'abord le système en volume fini, et on se place en dimension 1.

2.1 Générateur de la dynamique en volume fini

On considère la dynamique sur $\mathbb{T}_N$, le tore de taille N en dimension 1 : autrement dit, les conditions au bord sont supposées périodiques. Pour chaque particule $x \in \mathbb{T}_N$, on note $p_x \in \mathbb{R}$ son moment, et $q_x \in \mathbb{R}$ son écartement par rapport à sa position d'équilibre. On étudie l'évolution des configurations $\omega := (p_x, q_x)_{x\in\mathbb{T}_N}$. L'espace des configurations est $\Omega_N := (\mathbb{R}\times\mathbb{R})^{\mathbb{T}_N}$.

L'Hamiltonien est donné par

$$\mathcal{H}_N := \sum_{x\in\mathbb{T}_N} \left[\frac{p_x^2}{2} + W(q_x) + \frac{1}{2}V(q_{x+1}-q_x) + \frac{1}{2}V(q_x - q_{x-1})\right] \tag{8}$$

La fonction V, supposée paire, est appelée *potentiel d'interaction* ; W est le *potentiel de pinning*. Lorsque $W = 0$, on dit que le système est *unpinned*.

La dynamique déterministe est gouvernée par les équations de Newton :

$$\dot{p}_x(t) = \frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial q_x}\left(p_x(t), q_x(t)\right)$$
$$\dot{q}_x(t) = -\frac{\partial \mathcal{H}_N}{\partial p_x}\left(p_x(t), q_x(t)\right) = p_x(t)$$

Le générateur associé est

$$\mathcal{A} := \sum_{x\in\mathbb{T}_N^d} \left\{ p_x \cdot \partial_{q_x} - \partial_{q_x}\mathcal{H}_N \cdot \partial_{p_x} \right\} \tag{9}$$

On ajoute une perturbation stochastique, donnée par un générateur $\mathcal{S}$. Ce dernier agit uniquement sur les moments p_x et on veut qu'il conserve le moment total ainsi que l'énergie :

$$\mathcal{S}\left(\sum_x p_x\right) = 0, \qquad \mathcal{S}(\mathcal{H}_N) = 0 \tag{10}$$

Par exemple, on peut prendre le générateur d'échange, défini de la manière suivante : pour toute fonction $f : \Omega_N \to \mathbb{R}$,

$$\mathcal{S}f(\omega) := \sum_{x\in\mathbb{T}_N} \left\{ f(\omega^{x,x+1}) - f(\omega) \right\} \tag{11}$$

où $\omega^{x,x+1}$ est la configuration obtenue à partir de ω en échangeant les deux vitesses p_x et p_{x+1}.

Le générateur total de notre dynamique est :

$$\mathcal{L} := \mathcal{A} + \gamma\mathcal{S} \tag{12}$$

où $\gamma > 0$ est un paramètre qui permet de faire varier l'amplitude de la perturbation.

Aux équations de Newton on ajoute donc un terme stochastique :

$$\begin{aligned} dp_x(t) =& \Big\{ W'(q_x(t)) + \frac{1}{2}V'\big(q_x(t) - q_{x+1}(t)\big) - \frac{1}{2}V'\big(q_{x-1}(t) - q_x(t)\big)\Big\} dt \\ &+ \gamma \cdot \big[p_{x+1}(t^-) - p_x(t^-)\big] dN_{x,x+1}(t) + \gamma \cdot \big[p_{x-1}(t^-) - p_x(t^-)\big] dN_{x-1,x}(t) \end{aligned} \tag{13}$$

$$dq_x(t) = p_x(t)\ dt \tag{14}$$

où les $(N_{x,x+1}(t))_{x\in\mathbb{T}_N}$ sont des processus de Poisson standards indépendants. Autrement dit : sur chaque arête reliant x à $x+1$, on place une horloge qui sonne au bout d'un temps de loi exponentielle de paramètre 1. Lorsque cette horloge sonne, les vitesses p_x et p_{x+1} sont échangées.

La preuve de l'ergodicité pour ce modèle est faite dans [3].

2.2 Conservation de l'énergie et définition du courant

On note e_x l'énergie de la particule x :

$$e_x := \frac{p_x^2}{2} + W(q_x) + \frac{1}{2}\sum_{|y-x|=1} V(q_y - q_x) \tag{15}$$

D'après les équations (13) et (14), l'énergie totale est conservée par la dynamique et la loi de conservation de l'énergie s'écrit localement :

$$e_x(t) - e_x(0) = J_{x-1,x}(t) - J_{x,x+1}(t) \tag{16}$$

où $J_{x,x+1}(t)$ est le courant d'énergie total entre x et $x+1$ jusqu'au temps t. Il s'écrit :

$$J_{x,x+1}(t) = \int_0^t j_{x,x+1}(s)ds + M_{x,x+1}(t). \tag{17}$$

Ici, $M_{x,x+1}(t)$ est une martingale qui peut s'écrire explicitement grâce au calcul stochastique d'Itô, et $j_{x,x+1}$ est le courant instantané d'énergie vérifiant :

$$\mathcal{L}(e_x) = j_{x-1,x} - j_{x,x+1}. \tag{18}$$

Plus précisément,

$$j_{x,x+1} = -\frac{1}{2}V'(q_{x+1} - q_x)(p_{x+1} + p_x) + \gamma\frac{p_{x+1}^2 - p_x^2}{2}. \tag{19}$$

On remarque que le courant $j_{x,x+1}$ se décompose en

$$j_{x,x+1}^a + j_{x,x+1}^s$$

où $j_{x,x+1}^a$ et $j_{x,x+1}^s$ sont les courants instantanés associés respectivement aux générateurs $\mathcal{A}$ et $\mathcal{S}$. D'autre part,

$$j_{x,x+1}^s = \gamma\frac{p_{x+1}^2 - p_x^2}{2} \tag{20}$$

s'écrit sous forme d'un gradient.

2.3 Mesures canoniques et micro-canoniques

Cas "pinned". Dans ce cas, seule l'énergie totale $\mathcal{H}_N = \sum e_x$ est conservée par la dynamique. Pour chaque valeur fixée de l'énergie $\mathcal{E}$, on considère la sphère :

$$\Sigma_{N,\mathcal{E}} := \left\{(p_x, q_x)\ ;\ \sum_{x\in\mathbb{T}_N} e_x = N\mathcal{E}\right\} \tag{21}$$

La mesure uniforme $\mu_{N,\mathcal{E}}$ sur cette sphère est invariante pour la dynamique.

Cas "unpinned". Cette fois, deux quantités sont conservées : l'énergie totale $\mathcal{H}_N$, et le moment total $\sum p_x$. Comme précédemment, on fixe une énergie $\mathcal{E}$, et pour simplifier, on fixe $\sum p_x = 0$.

De la même façon, pour chaque valeur fixée de l'énergie $\mathcal{E}$, la mesure uniforme $\mu_{N,\mathcal{E}}$ sur la sphère est invariante pour la dynamique.

Définition 2.1. *Dans les deux cas, ces mesures sont appelées* mesures de Gibbs microcanoniques. *Nous noterons $\langle\cdot\rangle_{N,\mathcal{E}}$ l'espérance par rapport à ces mesures.*

On considère pour chacun des deux cas ci-dessus, les *mesures de Gibbs canoniques* : ce sont les mesures d'équilibre du système définies par

$$d\mu_{N,T} = \frac{e^{-\mathcal{H}_N/T}}{Z_{N,T}} \prod_{x\in\mathbb{T}_N} dp_x dq_x \tag{22}$$

où $T > 0$ est la température. L'espérance par rapport à la mesure $\mu_{N,T}$ est notée $\langle\cdot\rangle_{N,T}$.

Par la suite, on sera amené à considérer deux cas principaux :

1. **Cas harmonique :** $V(r) = r^2/4$ et $W(q) = \alpha q^2$
   - si $\alpha = 0$, on est dans le cas *harmonique unpinned*,
   - si $\alpha > 0$, on est dans le cas *harmonique pinned.*
2. **Cas anharmonique.**
   - $W = 0$ et V strictement convexe : cas *anharmonique unpinned*,
   - $W > 0$ et V quelconque : cas *anharmonique pinned.*

3 La formule de Green-Kubo

Nous allons donner une dérivation possible de la formule de Green-Kubo (il y en a d'autres, voir par exemple [4]). Pour simplifier, nous nous plaçons dans le cas "unpinned", c'est-à-dire : $W = 0$, et on considère la dynamique sur $\mathbb{Z}$. Le générateur formel de la dynamique en volume infini s'écrit :

$$\mathcal{L}f(\omega) := \sum_{x\in\mathbb{Z}} \left\{ p_x \cdot \frac{\partial f}{\partial q_x}(\omega) - \partial_{q_x}\mathcal{H}_N \cdot \frac{\partial f}{\partial p_x}(\omega) \right\} + \gamma \sum_{x\in\mathbb{Z}} \left\{ f(\omega^{x,x+1}) - f(\omega) \right\} \tag{23}$$

Deux quantités sont conservées, l'énergie et le moment. On considère les mesures d'équilibre en volume infini données par :

$$d\mu_T := \frac{e^{-\mathcal{H}_N/T}}{Z_T} \prod_{x\in\mathbb{Z}} dq_x dp_x \tag{24}$$

Sous μ_T, chaque énergie e_x a même espérance. Notons

$$\bar{e} := \langle e_x \rangle_T = \int e_x \; d\mu_T. \tag{25}$$

On définit la variance de l'énergie (appelée aussi *compressibilité*) :

$$\chi := \langle e_0^2 \rangle_T - \bar{e}^2. \tag{26}$$

On perturbe la mesure d'équilibre μ_T en ajoutant une énergie positive en 0, donnant ainsi une nouvelle mesure initiale :

$$d\tilde{\mu} := \frac{e_0}{\bar{e}} d\mu_T \tag{27}$$

Nous noterons $\langle \cdot \rangle_{\tilde{\mu}}$ l'espérance par rapport à la mesure $\tilde{\mu}$. On a les relations suivantes :

$$\langle e_0 \rangle_{\tilde{\mu}} = \bar{e} + \frac{\chi}{\bar{e}}$$
$$\langle e_x \rangle_{\tilde{\mu}} = \bar{e} \text{ pour tout } x \neq 0$$

Puis, lorsque le temps évolue :

$$\big\langle e_x(t) \big\rangle_{\tilde{\mu}} = \frac{\big\langle e_x(t) e_0(t) \big\rangle_T}{\bar{e}} \tag{28}$$

D'après la loi de Fourier, on s'attend à ce que l'énergie en chaque site x diffuse. Formellement, on pourrait dire que les nouvelles espérances vérifient les équations :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t} \big\langle e_x(t) \big\rangle_{\tilde{\mu}} = D \cdot \dfrac{\partial^2}{\partial x^2} \big\langle e_x(t) \big\rangle_{\tilde{\mu}} \\ \big\langle e_x(0) \big\rangle = \bar{e} + \dfrac{\chi}{\bar{e}} \delta_0(x) \end{cases} \tag{29}$$

où D est appelée *diffusivité thermique*. Ce n'est pas tout à fait juste car x est dans $\mathbb{Z}$. Pour être rigoureux, il faudrait se placer sur le réseau $\varepsilon\mathbb{Z}$ et faire tendre ε vers 0... On ne le fait pas ici, car notre objectif est simplement de comprendre l'origine de la formule de Green-Kubo.

Cette équation de la chaleur se résout en :

$$\big\langle e_x(t) \big\rangle_{\tilde{\mu}} = \bar{e} + \frac{\chi}{\bar{e}} \frac{e^{-x^2/4tD}}{\sqrt{4\pi t D}} \tag{30}$$

et la relation

$$D = \frac{1}{2t} \int x^2 \cdot \frac{e^{-x^2/4tD}}{\sqrt{4\pi t D}} dx \tag{31}$$

nous suggère de poser :

$$D := \lim_{t\to\infty} \frac{1}{2t\chi} \sum_{x\in\mathbb{Z}} x^2 \Big[\bar{e} \cdot \Big(\big\langle e_x(t) \big\rangle_{\tilde{\mu}} - \bar{e} \Big) \Big] = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{2t\chi} \sum_{x\in\mathbb{Z}} x^2 \cdot \Big(\big\langle e_x(t) e_0(0) \big\rangle_T - \bar{e}^2 \Big) \tag{32}$$

Enfin, la conductivité thermique est définie comme :

$$\kappa = \frac{\chi}{T^2} D = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{2tT^2} \sum_{x\in\mathbb{Z}} x^2 \cdot \Big(\langle e_x(t) e_0(0) \rangle_T - \langle e_0 \rangle_T^2 \Big) \tag{33}$$

Ceci est la première formule donnée dans l'introduction de [1]. Généralement, ce n'est pas sous cette forme que l'on trouve la formule de Green-Kubo. On a le théorème suivant :

Théorème 3.1. *Si la limite définie par* (33) *existe et est finie, alors :*

$$\kappa = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{2tT^2} \sum_{x\in\mathbb{Z}} \Big\langle J_{x,x+1}(t) J_{0,1}(t) \Big\rangle_T \tag{34}$$

où $J_{x,x+1}(t)$ *est le courant total d'énergie échangé entre* x *et* $x+1$ *jusqu'à l'instant* t*.*

Démonstration. La preuve est tirée de [3]. Posons

$$S(x,t) = \langle e_x(t) e_0(0) \rangle_T - \langle e_0 \rangle_T \tag{35}$$

On remarque que $S(x,t) = S(-x,t)$, et que $S(x,0) = \chi\delta_0(x)$. Par conséquent :

$$\sum_{x\in\mathbb{Z}} x^2 S(x,t) = \sum_{x\in\mathbb{Z}} x^2 [S(x,t) - S(x,0)] = \frac{1}{2} \sum_{x\in\mathbb{Z}} x^2 [S(x,t) + S(-x,t) - 2S(x,0)] \tag{36}$$

D'après la stationnarité et l'invariance par translation de μ_T, cette dernière quantité est égale à :

$$\begin{aligned} &-\frac{1}{2} \sum_{x\in\mathbb{Z}} x^2 \Big\langle \big[e_x(t) - e_x(0)\big] \big[e_0(t) - e_0(0)\big] \Big\rangle_T \\ &\qquad\qquad = -\frac{1}{2} \sum_{x\in\mathbb{Z}} x^2 \Big\langle \big[J_{x-1,x}(t) - J_{x,x+1}(t)\big] \big[J_{-1,0}(t) - J_{0,1}(t)\big] \Big\rangle_T \end{aligned} \tag{37}$$

On fait une sommation par parties, et on obtient

$$-\frac{1}{2} \sum_{x\in\mathbb{Z}} (2x+1) \Big\langle J_{x,x+1}(t) \big[J_{-1,0}(t) - J_{0,1}(t)\big] \Big\rangle_T \tag{38}$$

On utilise de nouveau l'invariance par translation, et on refait une deuxième sommation par parties, pour obtenir

$$\sum_{x\in\mathbb{Z}} \Big\langle J_{x,x+1}(t) J_{0,1}(t) \Big\rangle_T \tag{39}$$

C'est ce qu'on voulait. Notons que cette preuve est tout à fait formelle : d'abord, il faut être capable de bien définir la dynamique en volume infini. D'autre part, pour que la somme sur $\mathbb{Z}$ converge, il faut que $S(x,t)$ décroisse suffisamment vite par rapport à x. □

C'est la deuxième formule donnée dans l'introduction de [1].

Dans la littérature, on trouve plusieurs versions de la formule de Green-Kubo. Comme précédemment, on peut travailler avec le système infini, et sommer sur tout $x \in \mathbb{Z}$. On peut aussi partir d'un système fini avec conditions au bord périodiques, sommer sur $x \in \mathbb{T}_N$, et prendre la limite thermodynamique $N \to \infty$ (avant de prendre la limite $t \to \infty$). Dans ce cas, on a deux choix possibles pour la mesure d'équilibre : on peut prendre l'espérance des corrélations sous la mesure canonique μ_T, ou bien sous la mesure microcanonique $\mu_{N,\mathcal{E}}$. Grâce à l'équivalence des ensembles (voir Théorème 1.2.1 de [3]), on s'attend à ce que les deux définitions coïncident, à condition que l'énergie $\mathcal{E}$ soit reliée à T suivant la relation thermodynamique usuelle : $\langle e_0 \rangle_T = \mathcal{E}$. Néanmoins, aucune justification rigoureuse n'a encore été établie dans le cas général.

Conclusion 3.1. Quand on parle de la *formule de Green-Kubo*, il s'agit donc de l'une de ses versions. On y trouve à chaque fois les corrélations courant-courant. Au départ, elle provient d'une linéarisation de la perturbation. Souvent, on la définit telle quelle, et on étudie sa finitude. Si elle est infinie, c'est un premier argument pour dire que la loi de Fourier n'est sans doute pas vérifiée (mais ce n'est pas une preuve), et on parle alors de *diffusion anormale de l'énergie*.

4 Théorèmes principaux

On donne maintenant les théorèmes prouvés dans [1]. Tout d'abord, on introduit quelques notations, conformément aux différentes versions de la formule de Green-Kubo explicitées ci-dessus. On passe par la dynamique en volume fini : soit

$$\kappa^1(T) := \lim_{t\to\infty} \lim_{N\to\infty} \frac{1}{2tT^2} \sum_{x\in\mathbb{T}_N} \Big\langle J_{x,x+1}(t) J_{0,1}(t) \Big\rangle_{N,\mathcal{E}} \tag{40}$$

$$\kappa^1_N(T) := \frac{1}{2NT^2} \sum_{x\in\mathbb{T}_N} \Big\langle J_{x,x+1}(N) J_{0,1}(N) \Big\rangle_{N,\mathcal{E}} \tag{41}$$

avec $\mathcal{E} = \mathcal{E}(T)$ choisi tel que $\langle e_0\rangle_T = \mathcal{E}$. La première conductivité $\kappa^1(T)$ est la version micro-canonique de la formule de Green-Kubo, et $\kappa^1_N(T)$ est la conductivité thermique pour un système de taille finie N (en version micro-canonique).

$$\kappa^2(T) := \lim_{t\to\infty} \lim_{N\to\infty} \frac{1}{2tT^2} \sum_{x\in\mathbb{T}_N} \Big\langle J_{x,x+1}(t) J_{0,1}(t) \Big\rangle_{N,T} \tag{42}$$

$$\kappa^2_N(T) := \frac{1}{2NT^2} \sum_{x\in\mathbb{T}_N} \Big\langle J_{x,x+1}(N) J_{0,1}(N) \Big\rangle_{N,T} \tag{43}$$

De la même façon, $\kappa^2(T)$ est la version canonique de la formule de Green-Kubo, et $\kappa^2_N(T)$ est la conductivité en volume fini associée à cette version.

Remarque 4.1. On n'a aucun argument convaincant pour dire que $\kappa^1_N(T)$ et $\kappa^2_N(T)$ sont bien les conductivités thermiques associées à un système de taille finie. Cependant, les conclusions des théorèmes ci-dessous sont assez encourageants pour dire que cette définition n'est pas totalement absurde.

Théorème 4.1.

1. ***Cas harmonique pinned :*** *les limites définissant $\kappa^1(T)$ et $\kappa^2(T)$ existent et sont finies. De plus, $\kappa^1(T) = \kappa^2(T) = \kappa$ est indépendant de T.*
   Les deux suites $\kappa^1_N(T)$, $\kappa^2_N(T)$ convergent vers κ lorsque $N \to \infty$.

2. ***Cas harmonique unpinned :*** *les limites définissant $\kappa^1(T)$ et $\kappa^2(T)$ existent et sont infinies.*
   On a : $\kappa^1_N(T) \sim \sqrt{N}$ et de même pour $\kappa^2_N(T)$.

Remarque 4.2. Les physiciens, en prenant la définition suivante pour la conductivité sur un système de taille finie :

$$\kappa_N(T) = \frac{N\langle J\rangle_{N,T}}{\Delta T} \tag{44}$$

montrent le même comportement : $\kappa_N(T) \sim \sqrt{N}$.

Dans le cas anharmonique, on ne peut pas prouver l'existence de $\kappa^1(T)$ ou de $\kappa^2(T)$, mais on obtient des bornes pour la version canonique de la conductivité thermique en volume fini.

Théorème 4.2.

1. ***Cas anharmonique pinned :*** *Si V est quadratique, alors il existe une constante C (qui dépend de la température T) telle que*
$$\kappa^2_N(T) \leqslant C.$$

2. ***Cas anharmonique unpinned :*** *Si $0 < c_- \leqslant V'' \leqslant C^+ < \infty$ alors il existe une constante C (qui dépend de la température T) telle que*
$$\kappa^2_N(T) \leqslant C\sqrt{N}.$$

5 Idées de preuves : cas harmonique

5.1 Transformée de Laplace et fonction de corrélation

La preuve de ces théorèmes repose sur plusieurs lemmes techniques. La première étape consiste à relier les corrélations $\left\langle J_{x,x+1}(t)J_{0,1}(t)\right\rangle$ aux corrélations $\left\langle j_{x,x+1}(t)j_{0,1}(t)\right\rangle$. En effet, le courant instantané $j_{x,x+1}(t)$ peut être facilement explicité (19), alors que le premier s'exprime de manière plus compliquée.

Voici donc le premier lemme à démontrer :

Lemme 5.1. *Il existe une constante C_0 (qui dépend de γ et de T) telle que*

$$\frac{1}{2tT^2}\sum_{x\in\mathbb{T}_N}\left\langle J_{x,x+1}(t)J_{0,1}(t)\right\rangle = \frac{1}{2tT^2}\frac{1}{N}\left\langle\left(\sum_{x\in\mathbb{T}_N}\int_0^t j_{x,x+1}(s)ds\right)^2\right\rangle + C_0 \tag{45}$$

où $\langle\cdot\rangle$ peut être la mesure micro-canonique ou la mesure canonique.

Pour démontrer ce lemme, on a besoin de la propriété d'*équivalence des ensembles*. Cette propriété est prouvée dans l'article, seulement dans le cas harmonique. Les auteurs conjecturent que la formule ci-dessus est vraie aussi dans le cas anharmonique.

À partir de maintenant, on traite le cas de la version micro-canonique de la formule de Green-Kubo $\kappa^1(T)$ donnée par (40). Les calculs s'étendent facilement au cas de la version canonique.

Notons $\mathcal{J}_N := \sum_{x\in\mathbb{T}_N} j_{x,x+1}$. On veut étudier le comportement, lorsque $t\to\infty$, de la fonction

$$C(t) := \lim_{N\to\infty}\frac{1}{2tT^2}\frac{1}{N}\left\langle\left(\int_0^t \mathcal{J}_N(s)ds\right)^2\right\rangle_{N,\mathcal{E}} \tag{46}$$

(après avoir montré que la limite en N existe).

Pour cela, on étudie le comportement, lorsque $\lambda\to 0$, de la transformée de laplace $\mathfrak{L}(\lambda)$ de $tC(t)$:

$$\mathfrak{L}(\lambda) := \int_0^{+\infty} e^{-\lambda t}\ tC(t)dt \tag{47}$$

Par stationnarité, et intégration par parties, on montre (formellement) que

$$\mathfrak{L}(\lambda) = \frac{1}{\lambda^2T^2}\int_0^{+\infty} e^{-\lambda t}\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\big\langle\mathcal{J}_N(t)\mathcal{J}_N(0)\big\rangle_{N,\mathcal{E}}\ dt \tag{48}$$

Ainsi, obtenir une conductivité thermique finie revient (dans un certain sens) à obtenir une limite finie de $\lambda^2\mathfrak{L}(\lambda)$ lorsque $\lambda\to 0$. Plus précisément on veut montrer que :

$$\kappa^2(T) = C_0 + \lim_{\lambda\to 0}\lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\int_0^{+\infty} e^{-\lambda t}\big\langle\mathcal{J}_N(t)\mathcal{J}_N(0)\big\rangle_{N,\mathcal{E}}\ dt \tag{49}$$

et calculer explicitement cette limite, quand c'est possible.

5.2 Fonction de corrélation

Définition 5.1. *On appelle* fonction de corrélation *la fonction C_{cc} définie pour $t>0$ par :*

$$C_{cc}(t) := \lim_{N\to\infty}\frac{1}{N}\big\langle\mathcal{J}_N(t)\mathcal{J}_N(0)\big\rangle_{N,\mathcal{E}} \tag{50}$$

lorsque la limite en N existe.

A priori, on ne sait pas que sa limite existe, mais on peut facilement montrer qu'il existe une constante C_0 indépendante de N et de t telle que :

$$\left|\frac{1}{N}\big\langle\mathcal{J}_N(t)\mathcal{J}_N(0)\big\rangle_{N,\mathcal{E}}\right| \leqslant C_0 \tag{51}$$

On sait montrer que sa transformée de Laplace existe, et que l'on peut intervertir $\lim_{N\to\infty}$ et $\int$.

5.3 Équation de Poisson

Cette transformée de Laplace est très commode. En effet, le théorème de Hille-Yosida nous dit que :

$$(\lambda \mathrm{id} - \mathcal{L})^{-1}(f) = \int_0^{+\infty} e^{-\lambda t} P_t(f)\, dt \tag{52}$$

où P_t est le semi-groupe associé au générateur $\mathcal{L}$, et ainsi :

$$\int_0^{+\infty} e^{-\lambda t} \big\langle \mathcal{J}_N(t)\mathcal{J}_N(0)\big\rangle_{N,\mathcal{E}}\, dt = \Big\langle \mathcal{J}_N, (\lambda \mathrm{id} - \mathcal{L}_N)^{-1}(\mathcal{J}_N) \Big\rangle_{N,\mathcal{E}} \tag{53}$$

Tout cela est encore formel. Le lemme rigoureux est le suivant :

Lemme 5.2. *Dans le cas harmonique, pour tout $t > 0$, $C_{cc}(t)$ existe et on a*

$$\int_0^{+\infty} e^{-\lambda t} C_{cc}(t)\, dt = \lim_{N \to \infty} \langle j^a_{0,1}\ u_{\lambda,N} \rangle_{N,\mathcal{E}} \tag{54}$$

où $j^a_{x,x+1}$ est le courant apporté par le générateur antisymétrique $\mathcal{A}$, c'est à dire :

$$j^a_{x,x+1} = -\frac{1}{2} V'(q_{x+1} - q_x)(p_{x+1} + p_x) \tag{55}$$

et $u_{\lambda,N}$ est la solution de l'équation de Poisson :

$$(\lambda id - \mathcal{L})(u_{\lambda,N}) = -\sum_{x \in \mathbb{T}_N} j^a_{x,x+1} \tag{56}$$

Il reste à estimer cette fonction $u_{\lambda,N}$. Il se trouve que dans le cas harmonique, elle s'écrit de manière explicite. On calcule facilement la limite (54), et on en déduit la fonction $C_{cc}(t)$ par transformée de Laplace inverse.

On obtient le comportement suivant :

Lemme 5.3. *Dans le cas harmonique, la fonction de corrélation décroit comme*
- $C_{cc}(t) \sim 1/\sqrt{t}$ *dans le cas unpinned* ($W = 0$),
- $C_{cc}(t) \sim 1/t^{3/2}$ *dans le cas pinned.*

Une fois qu'on a ces estimations, il est assez simple de remonter jusqu'à la conductivité thermique $\kappa^2(T)$ en prouvant la formule (49). Les mêmes résultats sont vérifiés dans le cas canonique.

Conclusion 5.1. Avec tous ces ingrédients, on prouve les théorèmes 4.1 et 4.2. Le point le plus important consiste à étudier la fonction de corrélation $C_{cc}(t)$. L'introduction de la transformée de Laplace et de l'équation de Poisson permettent de faire converger les intégrales et de prouver que les limites existent bien.

Dans le cas anharmonique, l'équivalence des ensembles n'est pas prouvée, et il devient difficile d'estimer la décroissance de la fonction de corrélation. Pour cette raison, les calculs sont effectués uniquement dans le cas fini. D'autre part, on peut étendre les résultats en dimension supérieure : dans le cas harmonique, la conductivité thermique est finie dès que $d \geqslant 3$ ou dans les cas pinned.

Il y a donc beaucoup de façons de poser la formule de Green-Kubo, et beaucoup de façons de l'étudier. L'objectif le plus ambitieux serait de montrer que la conductivité thermique est finie pour des systèmes déterministes (ou avec une perturbation la plus faible possible)... mais on est encore loin d'un tel résultat.

Bibliographie

[1] Giada Basile, Cédric Bernardin, and Stefano Olla, *Thermal conductivity for a momentum conservative model*, Comm. Math. Phys. **287** (2009), no. 1, 67–98. MR 2480742 (2010f :82053)

[2] C. Bernardin and S. Olla, *Fourier's law for a microscopic model of heat conduction*, J. Stat. Phys. **121** (2005), no. 3-4, 271–289. MR 2185330 (2006j :82058)

[3] ———, *Non-equilibrium macroscopic dynamics of chains anharmonic oscillators*, in preparation, available at http ://www.ceremade.dauphine.fr/olla (2011).

[4] ———, *Transport properties of a chain of anharmonic oscillators with random flip of velocities*, J. Stat. Phys **145** (2011), 1124 :1255.

[5] Cédric Bernardin, *Thermal conductivity for a noisy disordered harmonic chain*, J. Stat. Phys. **133** (2008), no. 3, 417–433. MR 2448630 (2009m :82029)

[6] F. Bonetto, J. L. Lebowitz, and J. Lukkarinen, *Fourier's law for a harmonic crystal with self-consistent stochastic reservoirs*, J. Statist. Phys. **116** (2004), no. 1-4, 783–813. MR 2082192 (2006c :82058)

[7] L. A. Bunimovich and Ya. G. Sinaĭ, *Statistical properties of Lorentz gas with periodic configuration of scatterers*, Comm. Math. Phys. **78** (1980/81), no. 4, 479–497. MR 606459 (82m :82007)

[8] J. Fritz, T. Funaki, and J. L. Lebowitz, *Stationary states of random Hamiltonian systems*, Probab. Theory Related Fields **99** (1994), no. 2, 211–236. MR 1278883 (95g :82003)

[9] C. Kipnis and C. Landim, *Scaling limits of interacting particle systems*, Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences], vol. 320, Springer-Verlag, Berlin, 1999. MR 1707314 (2000i :60001)

[10] C. Landim, S. Olla, and H. T. Yau, *Some properties of the diffusion coefficient for asymmetric simple exclusion processes*, Ann. Probab. **24** (1996), no. 4, 1779–1808. MR 1415229 (98a :60150)

[11] J. L. Lebowitz, E. Lieb, and Z. Rieder, *Properties of harmonic crystal in a stationary non-equilibrium state*, J. Math. Phys. (1967), no. 8, 1073–1078.

[12] Joel L. Lebowitz and Herbert Spohn, *Transport properties of the Lorentz gas : Fourier's law*, J. Statist. Phys. **19** (1978), no. 6, 633–654. MR 521143 (80g :82031)

[13] Stefano Lepri, Roberto Livi, and Antonio Politi, *Thermal conduction in classical low-dimensional lattices*, Phys. Rep. **377** (2003), no. 1, 1–80. MR 1978992 (2004c :82101)

[14] S. Olla, S. R. S. Varadhan, and H. T. Yau, *Hydrodynamical limit for a Hamiltonian system with weak noise*, Comm. Math. Phys. **155** (1993), no. 3, 523–560. MR 1231642 (94k :60158)