



**SAPIENZA**  
UNIVERSITÀ DI ROMA

**Titolo della tesi**

**La Legge di Fourier per un cristallo anarmonico  
debolmente interagente**

**Facoltà di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali  
Corso di Laurea in Fisica**

**Candidata:**

Viviana LETIZIA

**n° matricola:**

997838

*Relatore:*

Giovanni JONA-LASINIO

*Relatore Esterno:*

Carlangelo LIVERANI

A/A 2010/2011

*”Les causes primordiales ne nous sont point connues; mais elles sont assujetties à des lois simples et constantes, que l’on peut découvrir par l’observation, et dont l’étude est l’objet de la philosophie naturelle. La chaleur pénètre, comme la gravité, toutes les substances de l’univers, ses rayons occupent toutes les parties de l’espace. Le but de notre ouvrage est d’exposer les lois mathématiques que suit cet élément. Cette théorie formera désormais une des branches les plus importantes de la physique générale.”*

*Jean-Baptist Fourier.*

# Introduzione

Quasi duecento anni fa Fourier congetturò che la temperatura, vicino all'equilibrio, tende a diffondersi attraverso i solidi. Descrisse il fenomeno del trasporto di calore ad un livello fenomenologico macroscopico, definendo una ben nota equazione alle derivate parziali. Da allora ad oggi, sebbene la conduzione del calore sia un fenomeno universalmente riconosciuto, la sua interpretazione sulla base di una dinamica microscopica reversibile ancora non ha ricevuto una risposta soddisfacente. Generalmente l'approccio adoperato per descrivere i fenomeni della meccanica statistica del non equilibrio, si basa sulla definizione dei coefficienti di trasporto attraverso equazioni fenomenologiche costitutive. Si postula la proporzionalità di quest'ultimi ai flussi ed alle forze termodinamiche, sotto l'ipotesi di essere abbastanza vicini all'equilibrio globale.

In realtà le relazioni fenomenologiche, hanno bisogno dell'ipotesi di *equilibrio locale*, ovvero che localmente sulla scala macroscopica è sempre possibile definire le variabili termodinamiche come densità, temperatura, potenziale chimico, etc., se queste quantità variano con regolarità. Quest'ipotesi implica anche che microscopicamente il sistema raggiunga l'equilibrio locale in un tempo molto più breve rispetto ai tempi tipici dell'evoluzione macroscopica. Si è in grado, dunque di separare le scale sia nello spazio che nel tempo.

Da un punto di vista teorico, si pongono dei quesiti che vanno oltre il calcolo effettivo dei coefficienti di trasporto, ad esempio quali sono le condizioni per cui si realizza l'equilibrio locale? È possibile trovare un unico stato stazionario di non equilibrio? Nel caso più specifico: quali sono i requisiti minimi per un sistema, tali da soddisfare la legge di Fourier?

Nella meccanica statistica dell'equilibrio lo studio di modelli semplici, come ad esempio il modello di Ising, ha permesso di evidenziare quei fenomeni che sono indipendenti dai dettagli microscopici del sistema e che avvengono in maniera equivalente su scala macroscopica. Per la meccanica statistica del

non equilibrio, la situazione è più complessa, è difficile definire delle classi generali di fenomeni per cui sia possibile farne uno studio unificato.

Lo stato di non equilibrio più semplice che si possa immaginare è lo stato stazionario di un sistema in contatto con differenti *reservoirs*. In questa condizione si creano delle correnti termiche attraverso il sistema, descritte macroscopicamente dai coefficienti di trasporto. L'ideale sarebbe di studiare questo stato partendo da un modello microscopico composto da atomi interagenti con forze realistiche e che evolvono attraverso la dinamica newtoniana. Al momento presente questo semplice progetto è al di là delle nostre conoscenze matematiche, e bisogna adottare modelli molto più semplici, nella speranza di coglierne qualche caratteristica essenziale.

Questo lavoro di tesi si propone di dare, in una prima parte, una descrizione della situazione attuale del problema della conduzione del calore, i modelli ed i metodi che sono stati proposti e le soluzioni esatte che sono state trovate, in modo da arrivare a capire perché siamo interessati a studiare un modello in particolare, il cristallo anarmonico debolmente interagente con condizioni al bordo stocastiche, che studiamo nella seconda parte. Per questo particolare modello dimostriamo che la dinamica microscopica opportunamente riscalata segue un'evoluzione autonoma.

# Capitolo 1

## La Legge di Fourier

Nel trattato "*Théorie analytique de la chaleur*," Fourier, dopo una breve discussione di meccanica razionale, prosegue con: "*Ma qualunque sia la portata delle teorie meccaniche, queste non si applicano agli effetti del calore, il quale induce un'ordine di fenomeni speciali, che non si possono spiegare con i principi del moto e dell'equilibrio*". Fourier continua con una descrizione della fenomenologia del trasporto del calore e deriva l'equazione alle derivate parziali che descrive il trasporto del calore, l'*Equazione del Calore*:

$$c_v(T) \frac{\partial}{\partial t} T(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot [\kappa(T) \nabla T]. \quad (1.1)$$

Dopo Boltzmann, Gibbs, Maxwell e l'invenzione della Meccanica Statistica decine di anni dopo il lavoro di Fourier, crediamo che Fourier fosse in torto: il trasporto di calore può e deve essere spiegato *con i principi del moto e dell'equilibrio*, cioè con il formalismo della Meccanica Statistica. Sebbene siano passati più di un centinaio di anni dalla fondazione della Meccanica Statistica a tutt'oggi non si è riusciti a derivare la Legge di Fourier a partire da principi primi.

La Legge di Fourier descrive le proprietà del trasporto macroscopico del calore, i.e. l'energia, nei sistemi in non equilibrio. Leggi simili sono valide per il trasporto di altre quantità localmente conservate, e.g. carica, densità di particelle, momento, etc.,... In nessuno di questi casi le leggi del trasporto macroscopico sono state derivate dalla dinamica microscopica.

## 1.1 La Legge Macroscopica

Consideriamo un sistema macroscopico caratterizzato al tempo iniziale,  $t = 0$ , da un profilo di temperatura nonuniforme  $T_0(\mathbf{r})$ . Questo profilo di temperatura genererà la corrente di calore, i.e. energia,  $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ . Per la conservazione dell'energia ed i principi della termodinamica:

$$c_v(T) \frac{\partial}{\partial t} T(\mathbf{r}, t) = -\nabla \cdot \mathbf{J}, \quad (1.2)$$

dove  $c_v(T)$  è il calore specifico per unità di volume. Se il profilo di temperatura fosse uniforme,  $T(\mathbf{r}) \equiv T_0$ , non ci sarebbe corrente nel sistema. È naturale assumere che, se il gradiente di temperatura è piccolo, la corrente è data dalla *Legge di Fourier*:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = -\kappa(T(\mathbf{r})) \nabla T(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

dove  $\kappa(T)$  è la conducibilità. Abbiamo assunto che non ci siano altri modi di trasportare energia, né flussi di massa, a parte la conduzione di calore. Combinando le due precedenti equazioni (1.2) e (1.3) otteniamo l'*Equazione del Calore*:

$$c_v(T) \frac{\partial}{\partial t} T(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot [\kappa(T(\mathbf{r})) \nabla T(\mathbf{r})] \quad (1.4)$$

## 1.2 Lo stato attuale della nostra conoscenza (o della nostra ignoranza).

Ci sono due casi in cui si osserva che la legge di Fourier sia valida con buona precisione.

1. Un sistema isolato macroscopico Il cui stato iniziale,  $t = 0$ , è alla temperatura non uniforme  $T_0(\mathbf{r})$ , ad esempio un fluido in un dominio  $\Lambda$  circondato da pareti adiabatiche. A  $t > 0$ , la temperatura cambia per via del calore, cioè l'energia, la corrente, con la densità di energia che soddisfa la legge di conservazione:

$$c_v(T) \frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J} = \nabla \cdot [\kappa \nabla T], \quad (1.5)$$

dove  $c_v(T)$  è il calore specifico per unità di volume e abbiamo assunto che non ci sia alcun flusso di massa o altri modi di trasporto dell'energia oltre la conduzione del calore (ignoriamo inoltre per semplicità

qualsiasi variazione in densità o pressione). L'eq. (1.5) si risolve data la condizioni iniziale  $T(\mathbf{r}, 0) = T_0(\mathbf{r})$  senza alcun flusso attraverso la frontiera di  $\Lambda$ . Lo stato stazionario ha una temperatura uniforme  $\bar{T}$  poichè l'energia totale è costante. Si può anche pensare che  $\Lambda$  sia un toro, cioè le condizioni al bordo sono periodiche.

2. Consideriamo un sistema in contatto con dei termostati a temperature costanti nel tempo  $T_\alpha$ , nei punti della frontiera  $\mathbf{r} \in (\partial\Lambda)_\alpha$  in contatto con l' $\alpha$ -esimo termostato,  $\alpha \geq 1$ . Quando il sistema tende allo stato stazionario la sua temperatura sarà data dalla soluzione di (1.5) con variazione di temperatura nulla:

$$\nabla \cdot \tilde{J}(\mathbf{r}) = \nabla \cdot (\kappa \nabla \tilde{T}(\mathbf{r})) = 0, \quad (1.6)$$

soggetto alla condizione al bordo  $\tilde{T}(\mathbf{r}) = T_\alpha$  per  $\mathbf{r} \in (\partial\Lambda)_\alpha$  e nessun flusso e nessun flusso attraverso il resto del bordo che è isolante o periodico nella direzione perpendicolare al flusso di calore.

Da un punto di vista fisico le due situazioni sono pressochè equivalenti. Abbiamo assunto che il sistema possa essere descritto dalla temperatura  $T(\mathbf{r}, t)$  definita in ogni punto di esso, ovvero che al livello microscopico, il sistema si trova in equilibrio termico locale (LTE). Più precisamente immaginiamo il sistema diviso in tanti piccoli cubi, ognuno grande abbastanza da contenere molti atomi, ma abbastanza piccolo sulla scala macroscopica da essere descrivibile ad ogni tempo  $t$ , come un sistema in equilibrio alla temperatura  $T(\mathbf{r}_i, t)$ , dove  $\mathbf{r}_i$  è il centro del dell' $i$ -esimo cubo. Per piccole variazioni nello spazio e nel tempo possiamo usare una descrizione continua  $T(\mathbf{r}, t)$

Questa nozione diventa precisa nel *limite di scaling idrodinamico* (HSL) dove il rapporto della scala micro-macro va a zero. Sulla scala di tempo macroscopica vediamo un cambio dello stato locale di equilibrio, le coordinate macroscopiche  $\mathbf{r}$  e  $t$  sono in relazione a quelle microscopiche  $\mathbf{q}$  e  $\tau$ , da  $\mathbf{r} = \epsilon \mathbf{q}$  e  $t = \epsilon^\alpha \tau$ , cioè se  $\Lambda$  é un cubo di lato  $\mathbf{l}$ , in unità di grandezza microscopica il lato é  $L = \epsilon^{-1} \mathbf{l}$ . Supponiamo che a  $t = 0$  il nostro sistema di  $N = \rho L^d$  particelle con Hamiltoniana:

$$H(P, Q) = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{j \neq i} V(q_j - q_i) + U(q_i) \right] \quad (1.7)$$

è descritto da una misura di Gibbs all'equilibrio con temperatura  $T(r) = T(\epsilon q)$ ; la densità dello spazio delle fasi è :

$$\mu_0(P, Q) \sim \exp\left\{-\sum_{i=1}^N \beta_0(\epsilon q_i) \left[ \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{j \neq i} V(q_i - q_j) + U(q_i) \right]\right\}, \quad (1.8)$$

dove  $Q = (q_1, \dots, q_N) \in \Lambda^{dN}$ ,  $P = (p_1, \dots, p_N) \in R^{dN}$ ,  $V(q)$  è un potenziale d'interazione tra le particelle,  $U(q_i)$  è un potenziale esterno e  $\beta_0^{-1} = T_0(r)$ .

Nel limite  $\epsilon \rightarrow 0$ ,  $\rho$  fissato, il sistema a  $t = 0$  sarà macroscopicamente in equilibrio termico locale alla temperatura  $T_0(r)$ . Noi siamo interessati al comportamento macroscopico del sistema al tempo  $t \geq 0$ , per  $\epsilon \gg 1$ , corrispondente al tempo microscopico  $\tau = \epsilon^{-\alpha} t$ , con  $\alpha = 2$  per la conduzione del calore o altri comportamenti diffusivi. L'assunzione che facciamo in questo modello è che  $T_0(r)$  varia di ordine  $\epsilon$  su una scala microscopica, allora per  $\epsilon \ll 1$ , il sistema sarà in uno stato molto vicino a quello di LTE con una temperatura  $T(r, t)$  che evolve nel tempo in accordo alla legge di Fourier.

**Dal punto di vista matematico il problema difficile è dimostrare che il sistema sta in LTE per  $t > 0$  quando la dinamica è hamiltoniana.** Questo richiede che il sistema macroscopico abbia forti proprietà macroscopiche, cioè che la sola misura invariante locale assolutamente continua, per sistemi spazialmente uniformi, sia di Gibbs. È stato dimostrato solo per dinamiche stocastiche, cioè per particelle browniane o gas sul reticolo. In questi sistemi la quantità conservata rilevante è la densità di particelle piuttosto che la densità di energia.

L'unico sistema hamiltoniano per cui una legge del trasporto macroscopico è stata derivata è un gas di particelle non interagenti che si muove su un reticolo fisso di scatteratori convessi periodici (gas di Lorentz periodico o biliardo di Sinai). Per questi sistemi uno può dimostrare una equazione di diffusione simile a quella di Fourier per la densità di particelle, sia per il problema del valore iniziale sia per il problema dello stato stazionario, con la costante di diffusione data dalla formula di Einstein-Green-Kubo. Sfortunatamente l'assenza d'interazione tra le particelle rende questo sistema poco realistico per lo studio della diffusione. In particolare non c'è il meccanismo di raggiungimento dello LTE, perché la velocità di ogni particella  $|\mathbf{v}|$  non cambia nel tempo e la costante di diffusione per ogni particella è proporzionale alla velocità. Le equazioni di diffusione per ogni particella sono disaccoppiate, che corrispondono alla equazione di diffusione solo quando tutte le particelle hanno la stessa velocità. Per rimediare a questo problema



dobbiamo aggiungere un'interazione fra le particelle, quindi derivare le equazioni accoppiate della diffusione sia per la densità di energia sia per la densità di particelle. Pensiamo che questo sistema con due leggi di conservazione ed una sorgente esterna per la dinamica caotica può essere il più semplice sistema hamiltoniano per cui si può dimostrare rigorosamente la diffusione del calore.

Diverrà chiaro che siamo lontani dall'aver dei risultati soddisfacenti, quando dobbiamo confrontarci con la definizione di stato stazionario di nonequilibrio (SNS) dei sistemi macroscopici i cui estremi siano fissati a temperature  $T_1$  e  $T_2$ . Sia  $\tilde{J}$  il valore di aspettazione nello stato stazionario di nonequilibrio (SNS), e SNS è descritto da una misura di energia o di corrente di calore dal termostato 1 al 2, nello spazio delle fasi. Definiamo la conducibilità  $\kappa_L = \frac{\tilde{J}}{A\delta T/L}$  dove  $\delta T/L = (T_1 - T_2)/L$  è l'effettivo gradiente di temperatura per un cilindro di lunghezza microscopica  $L$  e sezione uniforme  $A$ ;  $\kappa(T)$  è il limite di  $\kappa_L$  quando  $\delta T \rightarrow 0$  cioè  $T = T_1 = T_2$  e  $L \rightarrow \infty$ . L'esistenza di questo limite con  $\kappa$  positivo e finito è ciò che si vorrebbe dimostrare.

### 1.3 Conduzione di calore nei gas

*"the most interesting of all subjects, the history of the development of scientific ideas."*

*Maxwell.*

È sorprendente vedere come cambia il mondo a diverse scale: al livello microscopico le particelle collidono incessantemente e si muovono a caso senza alcuna ragione particolare, come è possibile che su larga scala quelle stesse particelle si riescano ad organizzare in maniera tale da formare un flusso ordinato? La ragione è che il moto delle particelle sottostà a vincoli di conservazione locale della massa, dell'impulso e dell'energia che non sono immediatamente visibili nel microscopico.

Al livello teorico notiamo che c'è una caratteristica notevole, infatti per determinare il comportamento macroscopico, ad esempio calcolare il flusso di energia, non dobbiamo risolvere le equazioni del moto microscopiche, perché la dinamica su larga scala è governata da un set di equazioni *autonome*. Le interazioni microscopiche appaiono solo indirettamente attraverso la termodinamica, l'equazione di stato, e attraverso i coefficienti di trasporto del

fluido. La dinamica autonoma emerge matematicamente attraverso un *limite di scaling*.

Abbiamo imparato che i moti microscopici delle particelle sono dati dalla soluzione di un sistema di equazioni differenziali ordinarie, una volta data la condizione iniziale, il futuro ed il passato sono determinati, allora il moto random è solo apparentemente random, riusciamo a dimostrarlo per pochi gradi di libertà. I punti nello spazio delle fasi che sono inizialmente vicini si separano esponenzialmente, questa dipendenza dal dato iniziale produce un comportamento dinamico caotico. Sfortunatamente per molti gradi di libertà non siamo in grado di comprendere il caos deterministico, ma la proprietà di mixing dinamico è tale da portare il sistema nello stato di equilibrio locale e di mantenerlo.

Le prime descrizioni della conduzione del calore nei gas risalgono alla “teoria cinetica”, ed è stato storicamente il primo esempio di interpretazione di un fenomeno macroscopico attraverso un’analisi microscopica [9]. I padri fondatori della teoria cinetica sono stati Clausius, Maxwell e Boltzmann che ottennero un’espressione teorica della conducibilità:

$$k \sim \sqrt{T} \tag{1.9}$$

indipendente dalla densità del gas. Per dimostrare questo risultato Clausius e Maxwell utilizzarono il concetto di cammino libero medio  $\lambda$ , ovvero la distanza media che una particella compie fra un urto e l’altro in un gas di densità  $\rho$ . Un’analisi diretta dà

$$\lambda \sim \frac{1}{\rho\pi\sigma^2} \tag{1.10}$$

dove  $\sigma$  è un diametro di “hard core” effettivo della particella. Loro hanno considerato un gradiente di temperatura nella direzione  $x$  ed hanno assunto che il gas fosse in equilibrio locale alla temperatura  $T(x)$ . Tra le collisioni una particella si muove di una distanza lunga  $\lambda$  trasportando un’energia cinetica proporzionale a  $T(x)$  da  $x$  a  $x + \frac{\lambda}{\sqrt{3}}$  mentre nella direzione opposta trasporta l’energia proporzionale a  $T(x + \lambda\sqrt{3})$ . Considerando che la velocità è proporzionale a  $\sqrt{T}$ , la quantità di energia per unità di area e per unità di tempo è attraverso un piano perpendicolare all’asse  $x$ ,  $J$  è approssimativamente

$$J \sim \rho\sqrt{T}[T(x) - T(x + \lambda\sqrt{3})] \sim \frac{\sqrt{T}}{\sigma^2} \frac{dT}{dx} \tag{1.11}$$

quindi vale (1.9) indipendentemente da  $\rho$ , in accordo con i risultati sperimentali. Se calcoliamo il flusso di calore in un punto  $x$  mediando la corrente di energia microscopica  $j = \rho v(\frac{1}{2}mv^2)$  con la distribuzione di una particella  $f(r, v, t)$  allora è solo la deviazione dall'equilibrio locale che dà un contributo. Il risultato è essenzialmente la (1.11). Questo risultato è stato dimostrato da Boltzmann che derivò una formula corretta per  $k$  nei gas, usando l'equazione di Boltzmann. Usando il limite di scaling idrodinamico è possibile derivare un'espansione controllata per la soluzione dell'equazione di Boltzmann che descrive lo stato stazionario di un gas accoppiato a due reservoirs di temperatura.

## 1.4 Conduzione di calore nei cristalli.

I cristalli, che sono elettricamente isolanti, conducono il calore attraverso le vibrazioni del reticolo, e volendo utilizzare i risultati della teoria cinetica, possiamo associare ad ogni modo vibrazionale una quasiparticella: il fonone, ed immaginare il solido come un gas di fononi che conducono il calore. Per un cristallo perfettamente armonico, i fononi si comportano come un gas di particelle noninteragenti, quindi la conducibilità non decresce se la lunghezza del cristallo aumenta e di conseguenza la conducibilità diventa infinita. Il cristallo reale, al contrario, non è armonico e i fononi interagiscono degradando la corrente termica, mantenendo la conducibilità finita, questo risultato può essere ottenuto anche aggiungendo imperfezioni nel reticolo ed impurità.

La conducibilità dei fononi è stata calcolata da Debye assumendo che le collisioni fra i fononi mantenessero l'equilibrio locale, ottenendo:

$$\kappa \sim c_v c^2 \tau \quad (1.12)$$

che in analogia a (1.9) sono stati sostituiti  $\rho$  dal calore specifico  $c_v$ ,  $\sqrt{T}$  dalla velocità media dei fononi e  $\lambda$  da  $c\tau$ , dove  $\tau$  è il tempo libero medio tra le collisioni. La conducibilità termica dipende dalla temperatura attraverso  $\tau$ , e per capire come avviene questa dipendenza Peierls [27] ha usato una teoria che estrapola un singolo fenomeno da cui deriva la finitezza della conducibilità. Il momento dei fononi nelle collisioni si conserva solo modulo un vettore del reticolo reciproco, allora possiamo classificare le collisioni in due classi, quelle in cui il momento è conservato (processi normali), e quelle in cui il momento iniziale e finale differiscono per un vettore non nullo del reticolo reciproco (processi *umklapp*), quindi la teoria di Peierls è la seguente: in assenza di

processi umklapp il cammino libero medio e la conducibilità termica in un solido isolante sono infiniti.

Per descrivere matematicamente la conducibilità termica nei cristalli consideriamo che ogni atomo oscilla attorno alla posizione di equilibrio, per cui possiamo identificarlo con essa, inoltre possiamo fare anche un'altra approssimazione, quella di interazione a primi vicini, dato che le forze interatomiche nei solidi hanno corto raggio. È utile aggiungere un potenziale di *pinning* che assicura che  $\exp(-\beta H(P, Q))$  sia integrabile rispetto alla misura  $dP dQ$ , infatti modella un substrato che rompe l'invarianza di traslazione ed il momento totale non è più una costante del moto.

## 1.5 Bagni termici

Per produrre un flusso di calore stazionario in un sistema dobbiamo accoppiarlo almeno a due reservoir di calore a temperature differenti, nel bulk la dinamica rimane puramente hamiltoniana mentre ai bordi c'è l'accoppiamento fisico.

Una descrizione realistica dei reservoir e del tipo di accoppiamento con il sistema è al momento al di fuori delle nostre capacità matematiche, perciò sono stati tentati nel tempo, dagli anni '50 ad oggi, vari studi analitici e numerici, con la speranza che lontano dai bordi tutti i modelli diano la stessa descrizione del sistema macroscopico.

### 1.5.1 Reservoir stocastico

L'accoppiamento è costituito dalle “condizioni al bordo di Maxwell”: quando una particella in un dominio  $\Lambda$  urta la parete in un punto  $\mathbf{r} \in \Lambda$  viene riflessa con un impulso dato dalla distribuzione maxwelliana:

$$f_{\mathbf{r}}(d\mathbf{p}) = \frac{\beta(\mathbf{r})^2}{2\pi m^2} \mathbf{p} \cdot \hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r}) e^{-\frac{\beta \mathbf{r} \mathbf{p}^2}{2m}} d\mathbf{p}, \quad (1.13)$$

dove  $\hat{\mathbf{n}}(\mathbf{r})$  è il versore normale a  $\partial\Lambda$  nella direzione entrante,  $\beta^{-1}(\mathbf{r})$  è la temperatura nel punto  $\mathbf{r}$ .

Per le particelle al bordo del cristallo in contatto con il reservoir, l'equazione del moto hamiltoniana viene modificata con un termine del tipo di Ornstein-Uhlenbeck:

$$m_i \dot{\mathbf{p}}_i = -\nabla_{\mathbf{q}_i} V(\mathbf{q}) - \lambda_\alpha \frac{\mathbf{p}_i}{m_i} + (2\lambda_\alpha T_\alpha)^{\frac{1}{2}} \xi_\alpha(t) \quad (1.14)$$

dove  $\alpha$  è l'indice del reservoir,  $\alpha \in \{L, R\}$ ,  $\lambda_\alpha$  descrive la forza dell'accoppiamento al reservoir alla temperatura  $T_\alpha$ , e  $\xi_\alpha$  è il rumore stocastico gaussiano con covarianza  $\langle \xi_\alpha(t)\xi_\beta(s) \rangle = \delta_{\alpha\beta}\delta(t-s)$ . La forma dei coefficienti è stata scelta in maniera tale da soddisfare il bilancio dettagliato, quindi se il sistema è accoppiato ad un singolo termostato alla temperatura  $T = \frac{1}{\beta}$ , lo stato stazionario del sistema è dato dalla misura di Gibbs  $Z^{-1}\exp(-\beta H(P, Q))$ .

### 1.5.2 Termostati

I termostati sono modellati da forze deterministiche (non hamiltoniane) [16]. Un primo esempio di questo tipo di reservoirs sono i termostati di "Nosè-Hoover" [19], ampiamente usati negli studi numerici. Mettendo questo tipo di termostato ai bordi di una scatola,  $\Lambda_L$  a sinistra e a destra  $\Lambda_R$ , le equazioni del moto delle particelle diventano:

$$\begin{aligned} m\ddot{\mathbf{q}}_i &= -\nabla_{\mathbf{q}_i}V(q) - \zeta_L\dot{\mathbf{q}}_i \\ m\ddot{\mathbf{q}}_i &= -\nabla_{\mathbf{q}_i}V(q) - \zeta_R\dot{\mathbf{q}}_i \end{aligned} \quad (1.15)$$

dove  $\mathbf{q}_i \in \Lambda_\alpha$  per un fluido e  $i \in \Lambda_\alpha$  per un cristallo,  $\alpha \in \{L, R\}$ . La variabile  $\zeta_\alpha$ , modella l'azione del termostato e soddisfa l'equazione

$$\dot{\zeta}_\alpha = \frac{1}{\Theta^2} \left( \frac{1}{T_\alpha} \sum_{i \in \Lambda_\alpha} \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} - 1 \right), \quad (1.16)$$

dove  $\theta$  è il tempo di risposta del reservoir. Il caso limite in cui  $\Theta \rightarrow 0$  il termostato diventa equivalente al termostato gaussiano, in cui l'energia delle particelle in  $\Lambda_L$  o  $\Lambda_R$  è una costante del moto, ottenendo

$$\zeta_L = \frac{\sum_{i < L} \mathbf{p}_i (\mathbf{f}(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_{i+1}) - \mathbf{f}(\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_{i+1})) \mathbf{f}_l(\mathbf{q}_i)}{\sum_{i < L} \mathbf{p}_i^2}. \quad (1.17)$$

### 1.5.3 Reservoir hamiltoniani/stocastici

In linea di principio bisognerebbe usare i *reservoir* stocastici, che però sono intrattabili a meno di non fare delle successive semplificazioni. Una di queste è tale che, partendo da un *reservoir* hamiltoniano ed integrando su dei gradi di libertà del *reservoir*, si arriva ad avere un *reservoir* stocastico. Un modello molto utilizzato da Eckmann et al. [12], è un sistema costituito da una catena

anarmonica di oscillatori accoppiati a ciascuna estremità ad un *reservoir* modellizzato da una equazione d'onda. La dinamica totale sistema e *reservoir* è hamiltoniana. Facciamo l'assunzione che inizialmente, i *reservoir* sono in equilibrio termico alle temperature  $T_L$  e  $T_R$ . Poiché i *reservoir* sono lineari, integrando rispetto alle loro coordinate la dinamica risultante è stocastica.

$$\begin{aligned}
\ddot{q}_1 &= -\nabla_{q_1} V(Q) + r_L \\
\ddot{q}_j &= -\nabla_{q_j} V(Q), \quad j = 2, \dots, N-1 \\
\ddot{q} &= -\nabla_{q_1} V(Q) + r_L \\
\dot{q} &= -\gamma_L(r_L - \lambda_L^2 q_1) + (2\gamma_L \lambda_L^2 T_L)^{1/2} \dot{w}_L \\
\dot{q} &= -\gamma_R(r_R - \lambda_R^2 q_1) + (2\gamma_R \lambda_R^2 T_R)^{1/2} \dot{w}_R
\end{aligned} \tag{1.18}$$

dove  $\lambda_{L,R}$  descrive l'intensità dell'accoppiamento con i *reservoir*,  $\gamma_{L,R}$  sono i parametri che descrivono l'accoppiamento e  $\dot{w}_{L,R}$  sono il rumore bianco.

Se i due *reservoir* sono alla stessa temperatura  $T_L = T_R = T$ , allora lo stato stazionario è dato dalla misura di Gibbs generalizzata, con densità

$$Z^{-1} \exp\left(-\frac{1}{T} G(P, Q, R)\right) \tag{1.19}$$

l'hamiltoniana generalizzata è

$$G(P, Q, R) = \left(\frac{r_L^2}{2\lambda_L^2} - q_1 r_L\right) + \left(\frac{r_R^2}{2\lambda_R^2} - q_N r_R\right) + H(P, Q). \tag{1.20}$$

Integrando sulle variabili ausiliarie dei *reservoir*  $r_L, r_R$  si ottiene la distribuzione di Gibbs efficace

$$\int dr_L dr_R Z^{-1} \exp\left(-\frac{1}{T} (G(P, Q, R))\right) = \hat{Z}^{-1} \exp\left(-\frac{1}{T} H_{eff}(P, Q)\right) \tag{1.21}$$

con  $H_{eff}(P, Q) = H(P, Q) + \lambda_L^2 q_1/2 + \lambda_R^2 q_N/2$ , che ha l'energia della catena.

## 1.6 Lo Stato Stazionario

### *"Some Important Open Problems.*

1. *"Free Energy" for NESS with currents.*
2. *Derivation of macroscopic equations for "realistic" Hamiltonian microscopic dynamics.*

3. *When almost all points in a phase space region  $\Gamma_{M_1}$  at time  $t_1$  go into a much much larger region  $\Gamma_{M_2}$  at time  $t_2$  so that  $|\Gamma_{M_2-M_1}\Gamma_{M_1} \cap \Gamma_{M_2}| \sim |\Gamma_{M_1}| \sim |\Gamma_{M_2}|$ , why does the future time evolution (but not the past time evolution) of almost all these phase points behave as if they were typical of  $\Gamma_{M_2}$ ?”*

*Lebowitz.*

Vogliamo dimostrare l'*esistenza* e se possibile anche l'*unicità* dello stato stazionario di un sistema fuori dall'equilibrio (NESS). Nel caso in cui tutti i reservoirs abbiano la stessa temperatura  $T$  l'esistenza è ovvia, perché i reservoirs sono scelti in maniera tale da lasciare invariata la distribuzione canonica sotto evoluzione temporale, invece l'unicità e l'approccio all'equilibrio possono presentare dei problemi e o anche non esistere per alcuni tipi di reservoirs e stati iniziali.

Il problema che veramente c'interessa è quando i reservoirs sono a diverse temperature, se la dinamica è stocastica ci aspettiamo che per "quasi tutte" le distribuzioni iniziali convergono verso un unico stato stazionario che è mixing. Questo è matematicamente un problema non banale: il sistema isolato ha uno spazio delle fasi non compatto ed ha molti stati invarianti, quando c'è l'accoppiamento con i reservoirs questi inducono un drift verso un particolare stato, poiché, però, l'accoppiamento è al bordo, dobbiamo dimostrare come l'energia viene trasmessa al sistema, per verificare l'esistenza di una misura invariante.

Data una hamiltoniana generica e dei reservoirs, la distribuzione iniziale corrisponde al prodotto delle due distribuzioni di equilibrio dei reservoirs per la generica distribuzione iniziale del cristallo. Ci aspettiamo che, per tempi lunghi, il sistema raggiunga uno stato limite che sarebbe, se le temperature dei due reservoirs sono diverse, uno stato descritto da gradiente di temperatura e da un flusso di calore. In generale lo stato dei reservoirs per  $t > 0$  non è invariante a quella temperatura, a cui sarebbe stazionario se fossero isolati, questo accade solo se non ci sono interazioni all'interno del reservoir.

## 1.7 Alcuni risultati esatti

### 1.7.1 Fluidi

Consideriamo un sistema di  $N$  particelle in un dominio  $\Lambda \subset \mathbb{R}^d$ ,  $d \geq 2$ , [12] [21][22], con una hamiltoniana

$$H(P, Q) = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{p_i^2}{2m} + \sum_{j \neq i} V(q_j - q_i) + U(q_i) \right] \quad (1.22)$$

in cui il potenziale pinning è nullo,  $u(q_i) = 0$ , ed il potenziale di accoppiamento è positivo,  $\phi(|q|)$ , limitato inferiormente da  $\phi(0) = C_1$ , e la derivata è compresa tra  $-C_2 < \phi'(|q|) < 0$ , con  $0 < C_1, C_2 < \infty$ , per  $|q| > 0$ . È stato dimostrato che, usando le condizioni al bordo di Maxwell alla temperatura  $T(r) > 0$ ,  $r \in \partial\Lambda$  (con  $\Lambda$  dominio regolare), esiste un'unica misura stazionaria  $\mu$ , assolutamente continua rispetto alla misura di Lebesgue su  $\Omega = \Lambda^N \times \mathbb{R}^{dN}$  e viene raggiunto nel limite  $t \rightarrow \infty$  da quasi qualsiasi  $(P, Q)$  iniziale, cioè l'insieme per cui non converge è a misura nulla.

### 1.7.2 Cristallo Armonico

Quando i potenziali di pinning e d'interazione sono funzioni quadratiche nei loro argomenti abbiamo un cristallo armonico. Un cristallo armonico in contatto con dei reservoirs di calore a diverse temperature ha uno stato stazionario di non equilibrio gaussiano, la cui matrice di covarianza viene ricavata esplicitamente, quindi è possibile conoscere tutte le proprietà dello stato stazionario il flusso di calore, la temperatura cinetica locale, etc. I primi risultati furono ottenuti per una catena di oscillatori armonici [28]. La misura stazionaria è data da

$$\mu_s(x) = \frac{1}{(2\pi)^N} \det[b^{-\frac{1}{2}}] e^{[-\frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{2N} b_{i,j}^{-1} x_i x_j]} \quad (1.23)$$

Nello stato stazionario si hanno delle correnti di calore il cui flusso è proporzionale alla differenza di temperatura  $(T_N - T_1)$  piuttosto che al gradiente di temperatura  $\frac{(T_N - T_1)}{N}$ , perciò il cristallo armonico non è un sistema fisico realistico.



### 1.7.3 Cristallo Anarmonico

A differenza del caso armonico, in cui la conducibilità andrebbe all'infinito, ci aspettiamo che il caso anarmonico la soddisfi, avendo la non linearità necessaria a mantenere la conducibilità finita, [10] [30] [31]. In realtà siamo abbastanza lontani dal dimostrare questo semplice assunto.

Sono necessarie delle condizioni sulla crescita del potenziale all'infinito, che deve essere quadratica all'infinito o più generalmente polinomiale, e sul potenziale d'interazione che deve essere strettamente convesso. Quest'ultima condizione da sola implica che lo stato stazionario è unico. Date queste condizioni sono validi i seguenti risultati. L'esistenza e l'unicità dello stato stazionario, che è mixing, ovvero qualsiasi distribuzione iniziale convergerà allo stato stazionario per  $t \rightarrow \infty$ . Lo stato stazionario ha densità  $C^\infty$ , che decade esponenzialmente almeno quanto lo stato di Gibbs co temperatura uguale al massimo della temperatura del reservoir. Lo stato stazionario è conduttivo. È valida la teoria della risposta lineare, vicino all'equilibrio il flusso di calore,  $\Phi$  verso il reservoir a temperatura più bassa è per  $T = \frac{T_L + T_R}{2}$

$$\Phi = \frac{\delta T}{T^2} D + O(\delta T^2) \quad (1.24)$$

dove  $D$  è il coefficiente di diffusione

$$D = \mu_0(\Phi L_0^{-1} \Phi) \quad (1.25)$$

sullo stato di Gibbs ed  $L_0$  è il generatore del semigruppato markoviano  $P_0^t$  all'equilibrio. Formalmente avremmo che

$$L_0^{-1} = \int_0^\infty dt P_0^t \quad (1.26)$$

ma per dimostrare questa relazione abbiamo bisogno di sapere qualcosa sul decadimento delle correlazioni.

### 1.7.4 Dinamiche ibride stocastiche

In questa sezione studiamo il caso in cui la dinamica hamiltoniana viene modificata dall'aggiunta di un rumore stocastico. Questo tipo di modello permette di produrre un meccanismo tale da distruggere la coerenza fra i fononi e di produrre un gradiente di temperatura e una normale conducibilità

termica. La derivazione rigorosa della legge di Fourier per un sistema con una dinamica hamiltoniana nel bulk, con un accoppiamento ai bordi con due reservoirs, è un problema aperto in fisica matematica. Nel caso di una catena armonica in cui ogni oscillatore è accoppiato ad un reservoir interno [8], ed ai bordi sono state fissate le temperature  $T_L$  e  $T_R$ ; si ha una differente derivazione dell'anarmonicità necessaria ad avere il gradiente di temperatura e la legge di Fourier. Quindi per tutti i sistemi con dinamica puramente stocastica, ad esempio il modello di Kipnis, Marchioro, Landim (KMP), i risultati si possono facilmente calcolare. I modelli ibridi in cui l'evoluzione è governata da una combinazione di dinamiche deterministiche e stocastiche, la cui parte deterministica può essere di due tipi differenti: nel primo è costruita per conservare l'energia o il momento, nel secondo tipo la parte stocastica è implementata accoppiando le particelle a dei bagni termici "interni" con cui scambiano energia. Nel seguito considereremo il modello ibrido del primo tipo, in cui la dinamica hamiltoniana viene perturbata da uno scambio casuale continuo di energia cinetica tra gli oscillatori primi vicini. Questo scambio casuale conserva l'energia cinetica totale e distrugge tutte le altre leggi di conservazione. In questo senso simula la non linearità a tempi lunghi nel modello deterministico. Questo scambio casuale di energia cinetica viene realizzato attraverso una diffusione sul cerchio ad energia cinetica costante dei primi vicini. L'interazione con i reservoir è modellizzata da un processo di Ornstein Uhlenbeck alle corrispondenti temperature.

### 1.7.5 Sistemi stocastici

Negli ultimi anni sono stati sempre più studiati i gas stocastici su reticoli, perché si dimostrano adatti ad essere un buon terreno di gioco per comprendere le proprietà dello stato stazionario di non equilibrio [4]. Vediamo in questa sezione alcuni particolari modelli di gas stocastici, da cui sono emerse le seguenti caratteristiche comuni:

1. una derivazione rigorosa dell'equilibrio locale e delle equazioni idrodinamiche a partire dalla dinamica microscopica;
2. una definizione di funzionale termodinamico di non equilibrio dalla teoria delle grandi fluttuazioni dinamiche, che risolve l'equazione di Hamilton-Jacobi, H-J, i cui argomenti indipendenti sono le variabili locali termodinamiche e l'input sono i coefficienti di trasporto;

3. le correlazioni a lungo range nel non equilibrio, che sono state osservate sperimentalmente in vari tipi di fluidi, sono una conseguenza dell'equazione H-J;
4. dall'analisi delle fluttuazioni sono emersi differenti regimi dinamici, interpretabili come fasi di transizione dinamici.

I gas stocastici su reticoli sono un insieme di cammini aleatori che si muovono su di un reticolo ed interagiscono l'uno con l'altro. Queste "particelle" sono da considerarsi indistinguibili. Lo stato macroscopico viene specificato indicando il numero di occupazione in ciascun sito del reticolo. L'effetto dell'interazione fa sì che la probabilità di saltare da un sito all'altro dipenda dalla configurazione locale delle particelle. Se il sistema non è isolato, l'effetto del reservoir crea un fenomeno di creazione ed annichilazione delle particelle al bordo, l'effetto di un campo esterno si formalizza tramite una perturbazione che porta ad un *drift* netto verso una specifica direzione.

Vediamo di seguito i modelli di gas stocastici su reticolo più noti. *il processo a zero range*, in cui qualsiasi numero di particelle in ogni sito è permesso, la particolarità di questo modello è che la misura invariante è una misura prodotto e può essere calcolata esplicitamente, di conseguenza non ci sono correlazioni a lungo raggio. Il *processo ad esclusione* impone a differenza del precedente la restrizione sul numero di particelle nel sito: se nel sito c'è una particella questo è occupato e nessuna particella vicina può saltarci dentro. Nel caso simmetrico, in assenza di campo esterno, l'unica misura invariante è l'ensemble canonico associato alla misura di Bernoulli, in presenza di campo esterno la misura di Bernoulli viene modificata da un parametro che rappresenta il potenziale chimico; se questo parametro non fosse costante si avrebbe la situazione di non equilibrio in cui la misura invariante non è prodotto e le correlazioni sono a lungo raggio. Il modello *Kipnis-Marchioro-Presutti* descrive una catena unidimensionale di oscillatori armonici, che sono meccanicamente accoppiati ma interagiscono stocasticamente, accoppiati alle estremità a due reservoirs. Lo stato stazionario anche nel caso di un singolo oscillatore è non banale: la misura invariante è una combinazione delle distribuzioni di Gibbs ad una temperatura compresa tra  $T_0$  e  $T_1$ , le temperature dei reservoirs. Altri modelli sono, *modello gradiente*, in cui la corrente è di tipo gradiente, ed ha la proprietà che qualsiasi campo esterno che soddisfi una richiesta di antisimmetria, non cambia la misura invariante. Infine la dinamica *Glauber+Kawasaki*, in questo modello il numero di particelle non è localmente conservato, vi la presenza di un termine di reazione che crea

o distrugge particelle, che però può, sotto opportune condizioni, lasciare la dinamica irreversibile.

Per i modelli descritti sopra siamo interessati a che l'evoluzione delle variabili termodinamiche nel limite di  $N \rightarrow \infty$ , venga descritta da un'evoluzione macroscopica chiusa, chiamata equazione idrodinamica. I dettagli microscopici sono compresi nei coefficienti di trasporto che appaiono nelle equazioni idrodinamiche. Per sistemi non reversibili si guardano le fluttuazioni della probabilità asintotica dal tipico comportamento idrodinamico, che definiscono l'energia libera di non equilibrio. L'energia libera di non equilibrio viene caratterizzata come soluzione di un problema variazionale, per cui è possibile derivare un'equazione di Hamilton-Jacobi.

# Capitolo 2

## Il caso armonico con singolo reservoir

### 2.1 Introduzione

In questo capitolo studiamo il problema di due particelle debolmente interagenti, sottoposte a potenziali armonici di pinning e di interazione. Idealmente si vorrebbe studiare un sistema non lineare in contatto con due *reservoir* a temperature diverse, non avendo gli strumenti necessari a risolvere questo problema, cerchiamo di studiare il caso di accoppiamenti in cui il sistema è vicino ad uno non interagente. La non linearità può, in linea di principio, essere trattata con le tecniche sviluppate in [25], che però devono essere adattate alla presenza dei *reservoir*. Nel seguito affrontiamo il problema (a), nel caso più semplice possibile cercando di ridurre al minimo l'uso dell'esistenza della misura stazionaria, in particolare nella dimostrazione della *tightness*. I problemi derivanti dall'uso dei *reservoir* sono di due tipi: (a) nella scala dei tempi che vogliamo studiare la dinamica del *reservoir* diventa molto rapida e non ammette alcun limite; (b) le tecniche utilizzate nel caso senza *reservoir* fanno un uso cruciale dell'esistenza di una misura invariante e delle sue proprietà, ma queste sono ignote nel caso in cui i *reservoir* sono presenti [22].

Le due particelle giocano rispettivamente i ruoli di reservoir, la particella etichettata con indice 1, e di sistema hamiltoniano, la particella 2. L'energia della particella "hamiltoniana" evolve attraverso la corrente, d'intensità proporzionale ad  $\epsilon$ , il parametro che regola la debole interazione con il reservoir. Vogliamo dimostrare, utilizzando un principio di media, che l'evoluzione del-

la particella “hamiltoniana” per tempi lunghi, rimane vicina alla dinamica di equilibrio, si tratta infatti di una variabile lenta, che si muove grazie alla corrente di energia, la variabile veloce. Se mediamo le correnti, in un tempo dell’ordine di  $\epsilon^{-1}$ , l’energia non si muove perché le correnti hanno media nulla rispetto alla misura di equilibrio, quindi dobbiamo guardare tempi dell’ordine  $\epsilon^{-2}$ , in cui l’energia si muove grazie alle fluttuazioni delle correnti all’equilibrio. Per cui dobbiamo stabilire un teorema del limite centrale sulla dinamica disaccoppiata, studiando l’equazione di Poisson  $L_0 u = j$ , dove  $L_0$  è il generatore della dinamica disaccoppiata, e  $j$  è la corrente di energia tra le due particelle. Per dimostrare il nostro teorema, abbiamo bisogno di verificare che la soluzione  $u$  esista e sia regolare, ma in questo caso particolare, di due particelle armoniche, troviamo che ha una semplice espressione di polinomio del secondo ordine, quindi è possibile calcolare esplicitamente l’equazione limite.

## 2.2 Il modello

Discutiamo il caso di due particelle che interagiscono debolmente e di cui una gioca il ruolo di *reservoir*. L’hamiltoniana del sistema ha quattro gradi di libertà  $(q_1, p_1, q_2, p_2) \in \mathbb{R}^8$ :

$$H = \frac{1}{2} \|p_1\|^2 + \frac{1}{2} \|p_2\|^2 + U(\|q_1\|) + U(\|q_2\|) + \epsilon V(\|q_1 - q_2\|) \quad (2.1)$$

c’è inoltre una forza stocastica che agisce sulla particella 2, conservandone l’energia cinetica, e una forza stocastica che agisce sulla particella 1 tenendola ad una temperatura fissata.

Per semplicità a cominciamo col considerare il caso in cui i potenziali sono armonici

$$U(q_i) = a_i \frac{\|q_i\|^2}{2}, \quad i = 1, 2 \quad V(q_1 - q_2) = \epsilon b_{12} \|q_1 - q_2\|^2. \quad (2.2)$$

Le equazioni del moto, per ciascuna componente  $k = 1, 2$ , sono :

$$\begin{aligned} dq_{1,k} &= p_{1,k} dt \quad , \quad dp_{1,k} = -\partial_{q_{1,k}} U dt - \alpha p_{1,k} dt + \sqrt{\frac{2\alpha}{\beta}} dw_{1,k} - \epsilon \partial_{q_{1,k}} V dt \\ dq_{2,k} &= p_{2,k} dt \quad , \quad dp_{2,k} = -\partial_{q_{2,k}} U dt - \frac{\sigma^2}{2} p_{2,k} dt + \sigma (Jp_2)_k dw - \epsilon \partial_{q_{2,k}} V dt, \end{aligned} \quad (2.3)$$

dove  $\alpha$  e  $\sigma$  sono costanti e  $J$  è la matrice:

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad J^2 = -I. \quad (2.4)$$

Questo particolare modello è il caso semplificato di quello che vorremmo analizzare nel prossimo capitolo: una catena di  $N$  particelle e due reservoir. Qui abbiamo due particelle, che giocano rispettivamente i ruoli di reservoir, la particella 1, secondo un processo di Ornstein-Uhlenbeck con drift proporzionale ad  $\alpha$  e rumore proporzionale a  $\frac{2\alpha}{\beta}$ ; e di sistema, la particella 2, sottoposta ad un rumore unidimensionale proporzionale a  $\sigma$ . Di quest'ultima siamo interessati a studiare il comportamento per tempi lunghi, verificando che l'energia della particella 2, nel limite  $\epsilon \rightarrow 0$ , alla scala temporale  $\epsilon^{-2}t$ , evolva autonomamente seguendo la soluzione di una equazione differenziale stocastica.

Come ci siamo proposti, sostituiamo i potenziali generici con dei potenziali armonici, ed otteniamo:

$$\begin{aligned} dq_{1,k} &= p_{1,k} dt & , & \quad dp_{1,k} = -a_1 q_{1,k} dt - \alpha p_{1,k} dt + \sqrt{\frac{2\alpha}{\beta}} dw_{1,k} - \epsilon 2b_{12}(q_{1,k} - q_{2,k}) dt \\ dq_{2,k} &= p_{2,k} dt & , & \quad dp_{2,k} = -a_2 q_{2,k} dt - \frac{\sigma^2}{2} p_{2,k} dt + \sigma (Jp_2)_k dw + 2\epsilon b_{12}(q_{1,k} - q_{2,k}) dt. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Poniamo per semplicità  $a_1 = a_2 = a$  e  $b_{12} = 1$ .

Calcoliamo il generatore della dinamica del sistema: sia  $f$  regolare, allora per la formula di Ito:

$$\begin{aligned} df(q_1, p_1, q_2, p_2) &= \partial_{q_1} f dq_1 + \partial_{p_1} f dp_1 + \frac{1}{2} \partial_{p_1}^2 f (dp_1)^2 \\ &+ \partial_{q_2} f dq_2 + \partial_{p_2} f dp_2 + \frac{1}{2} \partial_{p_2}^2 f (dp_2)^2, \end{aligned} \quad (2.6)$$

sostituendo i differenziali con le eq. (3.2) otteniamo:

$$\begin{aligned}
df(q_1, p_1, q_2, p_2) &= p_1 \cdot \partial_{q_1} f dt - a q_1 \cdot \partial_{p_1} f dt + \sqrt{\frac{2\alpha}{\beta}} \partial_{p_1} f \cdot dw_1 + \\
&- 2\epsilon(q_1 - q_2) \cdot \partial_{p_1} f dt - \alpha p_1 \cdot \partial_{p_1} f dt + \frac{\alpha}{\beta} \Delta_{p_1} f dt + p_2 \cdot \partial_{q_2} f dt + \\
&- a q_2 \cdot \partial_{p_2} f dt - \frac{\sigma^2}{2} p_2 \cdot \partial_{p_2} f dt + \sigma(Jp_2) \cdot \partial_{p_2} f dw + \\
&+ 2\epsilon(q_1 - q_2) \cdot \partial_{p_2} f dt + \frac{\sigma^2}{2} \sum_{i,j} (Jp_2)_i (Jp_2)_j \partial_{p_{2,i}} \partial_{p_{2,j}} f dt.
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Definiamo un campo vettoriale X come:

$$X = \langle Jp, \partial_p \rangle, \tag{2.8}$$

che al secondo ordine definisce una diffusione sulla sfera  $\|p_i\|^2 = \text{cost.}$ , conservativa delle energie cinetiche delle particelle:

$$\begin{aligned}
X^2 p^2 &= \sum_{i,j} [(Jp)_i \partial_{p_i} [(Jp)_j \partial_{p_j} p_j^2]] = \\
&= \sum_{i,j} 2(Jp)_i \partial_{p_i} [\sum_k J_{jk} p_k \partial_{p_j}] = \\
&= \sum_{i,j,k} 2(Jp)_i (\delta_{ik} p_j + J_{jk} p_k \delta_{ij}) = \\
&= \sum_{i,j,l} 2[J_{il} p_l J_{ij} p_j + J_{il} p_l J_{il} p_l] = \\
&= \sum_{i,l} 2[-\delta_{jl} p_l p_j + p_l^2] = 0.
\end{aligned} \tag{2.9}$$

Riscriviamo la (3.13), con la definizione data di X, ed otteniamo:

$$\begin{aligned}
L_\epsilon &= p_1 \cdot \partial_{q_1} - a q_1 \cdot \partial_{p_1} - \alpha p_1 \cdot \partial_{p_1} - 2\epsilon(q_1 - q_2) \cdot \partial_{p_1} \\
&+ \frac{\alpha}{\beta} \Delta_{p_1} + p_2 \cdot \partial_{q_2} - a q_2 \cdot \partial_{p_2} + 2\epsilon(q_1 - q_2) \cdot \partial_{p_2} + \frac{\sigma^2}{2} X_2^2.
\end{aligned} \tag{2.10}$$



Per  $\epsilon = 0$ , le misure stazionarie del sistema sono date dal prodotto misura di Gibbs sulla particella 1 e da una misura microcanonica sulla particella due:

$$\nu_{\beta, E_2^0}(dq_1, dp_1, dq_2, dp_2) = m_0^\beta(dq_1, dp_1)\mu_{E_2^0}(dp_2, dq_2). \quad (2.11)$$

Per  $\epsilon \neq 0$  possiamo verificare che una misura invariante è:

$$m_\epsilon^\beta(dq_1 dp_1 dq_2 dp_2) = Z_\epsilon^{-1}(\beta) e^{-\beta H_\epsilon} dq_1 dp_1 dq_2 dp_2, \quad (2.12)$$

infatti, prendendo una funzione  $f(q_1, p_1, q_2, p_2)$  regolare, si verifica che:

$$\begin{aligned} Z_\epsilon^{-1}(\beta) \int dp_1 dq_1 dq_2 dp_2 e^{-\beta H_\epsilon} L_\epsilon f(q_1, p_1, q_2, p_2) &= 0, \\ \text{dove } L_\epsilon &= L_{0,1} + L_{0,2} - \epsilon 2(q_1 - q_2)(\partial_{p_1} - \partial_{p_2}), \\ H_\epsilon &= H_{0,1} + H_{0,2} + \epsilon(q_1^2 - q_2^2) \end{aligned} \quad (2.13)$$

svolgiamo i calcoli

$$\begin{aligned} Z_\epsilon^{-1}(\beta) \int dp_1 dq_1 dq_2 dp_2 e^{-\beta(H_{0,1} + H_{0,2} + \epsilon(q_1^2 - q_2^2))} (L_{0,1} + L_{0,2}) f(q_1, p_1, q_2, p_2) + \\ - Z_\epsilon^{-1}(\beta) \int dp_1 dq_1 dq_2 dp_2 e^{-\beta(H_{0,1} + H_{0,2} + \epsilon(q_1^2 - q_2^2))} \epsilon 2(q_1 - q_2)(\partial_{p_1} - \partial_{p_2}) f(q_1, p_1, q_2, p_2) = \\ = Z_\epsilon^{-1}(\beta) \int dp_1 dq_1 dq_2 dp_2 e^{-\beta H_\epsilon} (\epsilon p_1 \beta (q_1 - q_2) - \epsilon p_2 \beta (q_1 - q_2) + \beta \epsilon (q_1 - q_2)(p_2 - p_1)) = 0 \end{aligned} \quad (2.14)$$

**Assunzione 2.2.0.1** *Assumiamo che il sistema al tempo iniziale abbia una distribuzione  $\nu_0 := F_\epsilon dm_\epsilon = F_0 dm_0$ , con densità iniziale  $F_0 \in L^2(\mathbb{R}^8, m_0)$ .*

## 2.3 Il risultato

Per ogni  $T > 0$ , il processo di Markov relativo al modello, definisce una probabilità su  $\Omega = C^0([0, T], \mathbb{R}^4)$ , chiamiamo  $\omega(t) = (q_1(t), p_1(t), q_2(t), p_2(t))$  l'elemento appartenente ad  $\Omega$ . Le due particelle hanno le seguenti energie:

$$\begin{aligned} E_1^\epsilon &= \frac{1}{2} p_1^2 + a \frac{q_1^2}{2} + \frac{1}{2} \epsilon (q_1 - q_2)^2 \\ E_2^\epsilon &= \frac{1}{2} p_2^2 + a \frac{q_2^2}{2} + \frac{1}{2} \epsilon (q_1 - q_2)^2 \end{aligned} \quad (2.15)$$

la loro evoluzione dipende dal debole accoppiamento fra le due. Se infatti prendiamo l'energia della particella 2, mentre non consideriamo la particella 1, perché quest'ultima evolve anche grazie al proprio rumore, ed utilizziamo prima la formula di Ito:

$$dE_2^\epsilon = p_2 dp_2 + \frac{1}{2}(dp_2)^2 + a q_2 dq_2 + \epsilon(q_1 - q_2)(dq_1 - dq_2) \quad (2.16)$$

e poi sostituiamo le (3.2), otteniamo che l'evoluzione temporale è

$$\partial_t E_2^\epsilon = \epsilon(q_1 - q_2)(p_1 + p_2). \quad (2.17)$$

Chiamiamo corrente la quantità  $j$ :

$$j = (q_1 - q_2)(p_1 + p_2), \quad (2.18)$$

per cui

$$\partial_t E_2 = \epsilon j. \quad (2.19)$$

Siamo interessati alla seguente variabile aleatoria riscalata nel tempo:

$$E_2^\epsilon(t) = E_2^\epsilon(q(\epsilon^{-2}t), p(\epsilon^{-2}t)) \quad (2.20)$$

per la quale vogliamo dimostrare il seguente risultato:

**Teorema 2.3.1** *Nel limite  $\epsilon \rightarrow 0$ , la legge di  $\{E_2^\epsilon\}$  converge alla soluzione debole della equazione differenziale stocastica*

$$dE_2 = \alpha(E_2, \frac{2}{\beta})dt + \gamma(E_2, \frac{2}{\beta})dB \quad (2.21)$$

dove  $dB$  è un moto Browniano standard e  $\alpha(E_2, \frac{2}{\beta}) = \frac{8}{a(2\alpha + \sigma^2)}(\frac{2}{\beta} - E_2)$  e  $\gamma(E_2, \frac{2}{\beta}) = \sqrt{\frac{16}{a(2\alpha + \sigma^2)}}(\frac{E_2}{\beta})$ .

Il generatore della diffusione secondo la (2.21) su  $\mathbb{R}_+$  è dato da

$$L = \gamma(E_2, \frac{2}{\beta})^2 \partial_{E_2}^2 + \alpha(E_2, \frac{2}{\beta}) \partial_{E_2}. \quad (2.22)$$

**Osservazione 2.3.1.1** *Si noti che la variabile aleatoria  $E_1^\epsilon(t) = E_1^\epsilon(q_1(\epsilon^{-2}t), p_1(\epsilon^{-2}t))$  non ha alcun limite. Il suo effetto per tempi lunghi è quello di determinare una temperatura effettiva nell'equazione (2.21).*

Per dimostrare il teorema (2.3.1), stabiliamo che la sequenza  $\{E_2^\epsilon(t)\}$  è *tight*, poi facciamo vedere che qualsiasi suo punto di accumulazione deve soddisfare la (2.21), e poiché la (2.21) ha un'unica soluzione, allora il punto di accumulazione deve essere unico, da cui si dimostra l'esistenza del limite.

## 2.4 La dimostrazione del teorema

### 2.4.1 *Tightness*

Vogliamo verificare che l'evoluzione dei processi stocastici  $E_2^\epsilon(t) \in C^0([0, T], \mathbb{R}_+)$  della particella hamiltoniana, secondo la misura iniziale sulle traiettorie  $\mathbb{P}_\epsilon$ , converge debolmente alla soluzione dell'equazione differenziale stocastica (2.21), ovvero che la misura converge alla misura associata al processo stocastico determinato dalla (2.21) della soluzione stocastica  $\mathbb{P}_\epsilon \Rightarrow \mathbb{P}$ . A questo scopo studiamo la "tightness" del processo  $E_2^\epsilon(t)$ .

Per dimostrare la tightness, utilizziamo il criterio di Kolmogorov [23], ovvero che il processo  $\{E^\epsilon(t)\}_{t \in [0, T]}$  è tight, se esistono delle costanti  $\alpha, \beta, \gamma, C > 0$ , tali che

1.  $\sup_\epsilon \mathbb{E}_\epsilon[|E^\epsilon(0)|^\nu] < \infty$ ;
2.  $\sup_\epsilon \mathbb{E}_\epsilon[|E^\epsilon(t) - E^\epsilon(s)|^\alpha] \leq C|t - s|^{1+\beta}$  per ogni  $t, s \in [0, T]$

rispetto alla misura stazionaria.

Stimiamo per  $\alpha = 4$  e  $\beta = 2$  la quantità

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_\epsilon [(E_2^\epsilon(s) - E_2^\epsilon(t))^4] &= \\ &= \epsilon^\alpha \mathbb{E}_\epsilon \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} j(\eta) d\eta \right)^4 \right]. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Data una soluzione dell'equazione di Poisson

$$L_0 u = j, \quad (2.24)$$

secondo l'evoluzione della dinamica disaccoppiata, che possiamo riscrivere in termini della dinamica effettiva  $L_\epsilon$  e della perturbazione data dall'interazione  $\epsilon L_*$ :

$$L_0 = L_\epsilon - \epsilon L_*. \quad (2.25)$$

data la (2.10) osserviamo che:

$$\begin{aligned} L_0 &= p_1 \cdot \partial_{q_1} - a q_1 \cdot \partial_{p_1} - \alpha p_1 \cdot \partial_{p_1} + \frac{\alpha}{\beta} \Delta_{p_1} + p_2 \cdot \partial_{q_2} - a q_2 \cdot \partial_{p_2} + \frac{\sigma^2}{2} X_2^2, \\ L_* &= 2\epsilon(q_1 - q_2) \cdot (\partial_{p_2} - \partial_{p_1}). \end{aligned} \quad (2.26)$$

sostituiamo quest'ultima nella (2.23) ed otteniamo:

$$\mathbb{E}_\epsilon \left[ (E_2^\epsilon(s) - E_2^\epsilon(t))^4 \right] = \epsilon^4 \mathbb{E}_\epsilon \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} (L_\epsilon u - \epsilon L_* u)(\eta) d\eta \right)^4 \right]. \quad (2.27)$$

Notiamo che  $L_\epsilon u$  definisce una martingala secondo l'espressione:

$$\int_{s\epsilon^{-2}}^{t\epsilon^{-2}} L_\epsilon u(\eta) d\eta = u(t\epsilon^{-2}) - u(s\epsilon^{-2}) + \epsilon M_{\epsilon^{-2}(t-s)}^u, \quad (2.28)$$

che sostituiamo esplicitando la dipendenza dai processi di Wiener:

$$\begin{aligned} &= \epsilon^4 \mathbb{E}_\epsilon \left[ \left( u(\epsilon^{-2}t) - u(\epsilon^{-2}s) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \left( \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} \gamma \partial_{p_1} u \cdot dw_1 + \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} \sigma(Jp_2) \cdot \partial_{p_2} u dw \right) - \epsilon \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} L_* u ds \right)^\alpha \right] \end{aligned} \quad (2.29)$$

che maggioriamo utilizzando la disuguaglianza di Jensen

$$\begin{aligned} &\leq 4^{\alpha-1} \epsilon^\alpha \left\{ \mathbb{E}_\epsilon \left[ (u(\epsilon^{-2}t) - u(\epsilon^{-2}s))^\alpha \right] + \right. \\ &\quad + \mathbb{E}_\epsilon \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} \gamma \partial_{p_1} u \cdot dw_1 \right)^\alpha \right] + \mathbb{E}_\epsilon \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} \sigma(Jp_2) \cdot \partial_{p_2} u dw \right)^\alpha \right] + \\ &\quad \left. + \epsilon^\alpha \mathbb{E}_\epsilon \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} L_* u d\eta \right)^\alpha \right] \right\} \leq 4^{\alpha-1} (I + II + III + IV). \end{aligned} \quad (2.30)$$

Ora facciamo le stime termine a termine, facendo uso del fatto che la soluzione  $u$ , dell'equazione di Poisson è un polinomio (vedi (2.43)) quindi, il valore atteso delle sue potenze rispetto alla misura  $m_\epsilon$  è limitato.

La prima

$$\begin{aligned} \epsilon^\alpha \mathbb{E}_\epsilon \left( (u(\epsilon^{-2}s) - u(\epsilon^{-2}t))^\alpha \right) &\leq C \epsilon^\alpha \mathbb{E}_\epsilon \left( u(\epsilon^{-2}s)^\alpha \right) + C \epsilon^\alpha \mathbb{E}_\epsilon \left( u(\epsilon^{-2}t)^\alpha \right) \leq \\ &\leq C \epsilon^\alpha \mathbb{E}_\epsilon \left( u(0)^\alpha \right) \leq \\ &\leq C(t-s)^2, \end{aligned} \quad (2.31)$$

per  $|t-s| \geq \epsilon^2$ . Nel caso opposto, in cui  $|t-s| \leq \epsilon^2$ , per tempi molto piccoli, possiamo utilizzare la stima:

$$\begin{aligned} \epsilon^4 \mathbb{E}_\epsilon \left( \left( \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} j(\tau) d\tau \right)^4 \right) &\leq \epsilon^4 [h\epsilon^{-2}]^3 \mathbb{E}_\epsilon \left( \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} j(\tau)^4 d\tau \right) \\ &\leq C \epsilon^4 [h\epsilon^{-2}]^4 = Ch^2. \end{aligned}$$

Gli altri due termini successivi sono delle martingale, per stimare le quali utilizziamo il seguente teorema [17] :

**Teorema 2.4.1** *Sia  $f(t) \in H_2[0, T]$  e  $\int_0^T \mathbb{E}_\epsilon[f^{2m}(t)]dt < \infty$ . Allora*

$$\mathbb{E} \left[ \left( \int_0^T f(t)dw(t) \right)^{2m} \right] \leq [m(2m - 1)]^{m-1} T^{m-1} \int_0^T \mathbb{E}[f^{2m}(t)]dt. \quad (2.32)$$

Poniamo  $m = 4$ :

$$\begin{aligned} \epsilon^4 \mathbb{E}_\epsilon \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} \gamma \partial_{p_1} u \cdot dw_1 \right)^4 \right] &\leq 6\epsilon^2 \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} \mathbb{E}_\epsilon [(\gamma \partial_{p_1} u)^4] d\eta \leq \\ &\leq C_3(t - s)^2 = II; \end{aligned} \quad (2.33)$$

ed equivalentemente

$$\begin{aligned} \epsilon^4 \mathbb{E}_\epsilon \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} \sigma(Jp_2) \cdot \partial_{p_2} u d\eta \right)^4 \right] & \\ \leq 6\epsilon^4 \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} \mathbb{E}_\epsilon [\sigma(Jp_2) \cdot \partial_{p_2} u]^4 d\eta &\leq \\ \leq C_4(t - s)^2 = III. & \end{aligned} \quad (2.34)$$

Per l'ultima disuguaglianza svolgiamo i calcoli e troviamo che,

$$\begin{aligned} \epsilon^8 \mathbb{E}_\epsilon \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} L_* u ds \right)^4 \right] &= (t - s)^4 \mathbb{E}_\epsilon \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} L_* u \frac{d\eta}{\epsilon^{-2}(t - s)} \right)^4 \right] \leq \\ &\leq (t - s)^4 \mathbb{E}_\epsilon \left[ \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} (L_* u)^4 \frac{d\eta}{\epsilon^{-2}(t - s)} \right] = \\ &= \epsilon^2 (t - s)^3 \int_{\epsilon^{-2}s}^{\epsilon^{-2}t} \mathbb{E}_\epsilon [(L_* u)^4] d\eta \leq \\ &\leq C_5(t - s)^4 = IV. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Alternativamente, per dimostrare la tightness, avremmo potuto utilizzare il metodo della decomposizione della corrente in due martingale una “backward ed una forward” [35], questo approccio richiede sia una conoscenza della misura stazionaria sia informazioni sul processo invertito nel tempo. Non è assolutamente chiaro come adattare un tale argomento al caso con due *reservoir*. Al contrario l'argomento qui usato richiede informazioni minime sulla misura stazionaria e quindi si presta a generalizzazioni.

## 2.4.2 Caratterizzazione del limite

Dopo aver visto nella sezione precedente che  $E_2^\epsilon(t)$  è un processo tight, dimostriamo che qualsiasi suo punto di accumulazione deve soddisfare l'equazione differenziale stocastica (2.21). Ancor più precisamente possiamo dire che: poiché possiamo riscrivere l'energia come integrale della corrente associata,

$$E_2^\epsilon(t) - E_2^\epsilon(0) = \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2}t} j(s) ds, \quad (2.36)$$

allora si dimostra che esiste una martingala, a media nulla e varianza quadratica data da

$$2 \int_0^t \gamma^2(E_2^\epsilon(s), \frac{2}{\beta}) ds \quad (2.37)$$

tale che, per ogni  $t \geq 0$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_F^\epsilon \left( \left| \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2}t} j(s) ds - \int_0^t \alpha(E_1^\epsilon(s), E_2^\epsilon(s)) ds + M_{\epsilon_t}^u \right| \right) = 0 \quad (2.38)$$

dove  $M_{\epsilon_t}^u$  è una martingala la cui varianza quadratica converge alla (2.37).

Cominciamo col risolvere esplicitamente l'equazione di Poisson,

$$L_0 u = j. \quad (2.39)$$

Dato un polinomio di secondo grado

$$\begin{aligned} u(p_1, p_2, q_1, q_2) &= c_1 q_1^2 + c_2 q_2^2 + c_3 p_1^2 + c_4 p_2^2 + c_5 q_1 q_2 + c_6 q_1 p_1 + c_7 q_1 p_2 + \\ &+ c_8 q_2 p_1 + c_9 q_2 p_2 + c_{10} p_1 p_2, \end{aligned} \quad (2.40)$$

sostituendolo in (3.37), otteniamo

$$(p_1 \cdot \partial_{q_1} - a q_1 \cdot \partial_{p_1} - \alpha p_1 \cdot \partial_{p_1} + \frac{\gamma^2}{2} \Delta_{p_1} + p_2 \cdot \partial_{q_2} - a q_2 \cdot \partial_{p_2} + \frac{\sigma^2}{2} X_2^2) u = j \quad (2.41)$$

ovvero

$$\begin{aligned}
j(p_1, p_2, q_1, q_2) &= -ac_6q_1^2 - ac_9q_2^2 - (2\alpha c_3 - c_6)p_1^2 + c_9p_2^2 - (ac_7 + ac_8)q_1q_2 + \\
&+ (2c_1 - 2ac_3 - \alpha c_6)q_1p_1 + (c_5 - \frac{\sigma^2 c_7}{2} - ac_{10})q_1p_2 + \\
&+ (c_5 - \alpha c_8 - ac_{10})q_2p_1 + (2c_2 - 2ac_4 - \frac{\sigma^2 c_9}{2})q_2p_2 + \\
&+ (c_7 + c_8 - \alpha c_{10} - \frac{\sigma^2 c_{10}}{2})p_1p_2.
\end{aligned} \tag{2.42}$$

Per ottenere questa corrente, ricordando (2.10), risolviamo il sistema:

$$\left\{ \begin{array}{l} -ac_6q_1^2 \\ -ac_9q_2^2 \\ -2\alpha c_3 + c_6)p_1^2 \\ c_9p_2^2 \\ (-ac_7 - ac_8)q_1q_2 \\ (2c_1 - 2ac_3 - \alpha c_6)q_1p_1 \\ (c_5 - \frac{\sigma^2 c_7}{2} - ac_{10})q_1p_2 \\ (c_5 - \alpha c_8 - ac_{10})q_2p_1 \\ (2c_2 - 2ac_4 - \frac{\sigma^2 c_9}{2})q_2p_2 \\ (c_7 + c_8 - \alpha c_{10} - \frac{\sigma^2 c_{10}}{2})p_1p_2 \end{array} \right. \begin{array}{l} = 0 \\ = 0 \\ = 0 \\ = 0 \\ = 0 \\ = q_1p_1 \\ = q_1p_2 \\ = -q_2p_1 \\ = -q_2p_2 \\ = 0 \end{array}$$

per cui la soluzione  $u(p_1, p_2, q_1, q_2)$  deve essere:

$$\begin{aligned}
u(p_1, p_2, q_1, q_2) &= \frac{1}{2}q_1^2 - (\frac{1}{2} - ac_4)q_2^2 + c_4p_2^2 + (-1 + \frac{4\alpha}{2\alpha + \sigma^2})q_1q_2 + \\
&- \frac{4}{2\alpha + \sigma^2}q_1p_2 + \frac{4}{2\alpha + \sigma^2}q_2p_1,
\end{aligned} \tag{2.43}$$

dove scegliamo, per convenienza,  $c_4 = 0$ .

Con questa scelta, troviamo che:

$$L_\epsilon u = j - \epsilon \frac{8}{2\alpha + \sigma^2}(q_1^2 - q_2^2). \tag{2.44}$$

Notiamo che abbiamo trovato esplicitamente il valore di  $L_*u$ :

$$L_*u = \frac{8}{2\alpha + \sigma^2}(q_1^2 - q_2^2). \tag{2.45}$$

Quindi, identificando con  $\omega(s) = (q(s), p(s))$  un cammino, abbiamo

$$\begin{aligned}
 E_2^\epsilon(t) - E_2^\epsilon(0) &= \int_0^{t\epsilon^{-2}} \epsilon j(s) ds = \\
 &= \epsilon \int_0^{t\epsilon^{-2}} (L_\epsilon u)(\omega_s) ds + \epsilon^2 \frac{8}{2\alpha + \sigma^2} \int_0^{t\epsilon^{-2}} (q_1^2 - q_2^2)(s) ds = \\
 &= \epsilon(u(\omega_{t\epsilon^{-2}}) - u(\omega_0)) + M_{\epsilon^{-2}t}^u + \epsilon^2 \frac{8}{2\alpha + \sigma^2} \int_0^{t\epsilon^{-2}} (q_1^2 - q_2^2)(s) ds.
 \end{aligned} \tag{2.46}$$

Abbiamo introdotto la martingala centrata  $M_{\epsilon^{-2}t}^u$

$$\epsilon u(\omega(\epsilon^{-2}t)) = \epsilon u(\omega(0)) + \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2}t} L_\epsilon u(\omega(s)) ds - M_{\epsilon^{-2}t}^u. \tag{2.47}$$

La variazione quadratica di  $M_{\epsilon^{-2}t}^u$  si può calcolare usando il Lemma di Ito

$$du(\omega(q_1, p_1, q_2, p_2)) = L_\epsilon u dt + \gamma \partial_{p_1} u dw_1 + \sigma(Jp_2) \cdot \partial_{p_2} u dw, \tag{2.48}$$

troviamo che

$$M_{\epsilon^{-2}t}^u = \int_0^{\epsilon^{-2}t} \gamma \partial_{p_1} u \cdot dw_1 + \int_0^{\epsilon^{-2}t} \sigma(Jp_2) \cdot \partial_{p_2} u dw, \tag{2.49}$$

è composta separatamente dal contributo del rumore planare del *reservoir*  $w_1$ , e da quello unidimensionale  $w$  del sistema hamiltoniano, perciò abbiamo:

$$\begin{aligned}
 \langle\langle [\epsilon M_{\epsilon^{-2}t}^u]^2 \rangle\rangle &= \epsilon^2 \int_0^{\epsilon^{-2}t} [\gamma^2 (\nabla_{p_1} u)^2 + \sigma^2 (X_2 u)^2](\omega_s) ds = \\
 &= \epsilon^2 \frac{16}{(2\alpha + \sigma^2)^2} \int_0^{\epsilon^{-2}t} [\sigma^2 (p_{2,1} q_{1,2} - p_{2,2} q_{1,1})^2 + \gamma^2 q_2^2](s) ds.
 \end{aligned} \tag{2.50}$$

Per chiudere l'equazione di evoluzione, nel limite di  $\epsilon \rightarrow 0$ , dobbiamo dimostrare che (vedi (2.11) per la definizione di  $\nu_{E_2^0, \beta}$ )

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left| \epsilon^2 \int_0^{\epsilon^{-2}t} [L_* u(\omega_s) - \nu_{\beta, E_2^0}(L_* u)(\omega_s)] ds \right|^2 = 0 \tag{2.51}$$

e che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left| \epsilon^2 \int_0^{\epsilon^{-2}t} \left[ (\gamma^2 (\nabla_{p_1} u)^2 + \sigma^2 (X_2 u)^2)(\omega_s) - \nu_{\beta, E_2^0}(\gamma^2 (\nabla_{p_1} u)^2 + \sigma^2 (X_2 u)^2)(\omega_s) \right] ds \right|^2 = 0 \tag{2.52}$$



Questi limiti sono una conseguenza del fatto che, la soluzione  $u$  ed  $L_*u$  sono polinomi e per ogni  $E_2 > 0$  vale il seguente lemma:

**Lemma 2.4.2** *Sia  $f(\omega)$  una funzione in  $L_2(\nu_{E_2^0, \beta})$  tale che  $\nu_{E_2^0, \beta}(f) = 0$ , allora*

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left| \epsilon^2 \int_0^{\epsilon^{-2t}} f(\omega_s) ds \right|^2 = 0. \quad (2.53)$$

**Dimostrazione** Per la stazionarietà abbiamo che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left| \epsilon^2 \int_0^{\epsilon^{-2t}} f(\omega_s) ds \right|^2 = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left| \epsilon^2 T \sum_{k=1}^{\epsilon^{-2t}/T} \frac{1}{T} \int_0^T f(s + kT) ds \right|^2 \quad (2.54)$$

applicando la disuguaglianza di Jensen otteniamo

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left| \epsilon^2 T \sum_{k=1}^{\epsilon^{-2t}/T} \frac{1}{T} \int_0^T f(s + kT) ds \right|^2 \leq t^2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left| \frac{1}{T} \int_0^T f(s) ds \right|^2 \quad (2.55)$$

allora possiamo mandare  $T \rightarrow \infty$

$$t^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left| \frac{1}{T} \int_0^T f(s) ds \right|^2 = t^2 \lim_{T \rightarrow \infty} \mathbb{E}_0 \left| \frac{1}{T} \int_0^T f(\omega_s) ds \right|^2 = 0 \quad (2.56)$$

e vediamo che il risultato segue dall'ergodicità della dinamica della particella 2.  $\square$

Fino a questo punto abbiamo ottenuto che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left( \left| \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2t}} j(s) ds - \epsilon^2 \int_0^{\epsilon^{-2t}} \nu_{\beta, E_2}(L_*u)(\omega_s) ds + M_{\epsilon^{-2t}}^u \right|^2 \right) = 0. \quad (2.57)$$

dove  $M_{\epsilon^{-2t}}^u$  converge in legge alla martingala  $\hat{M}^\epsilon$  con la varianza quadratica data da

$$\begin{aligned} \langle\langle \hat{M}^\epsilon \rangle\rangle &= \int_0^{\epsilon^{-2t}} \nu_{\beta, E_2} [\sigma^2 (\nabla_{p_1} u)^2 + \gamma^2 (X_2 u)^2] (\omega_s) ds = \\ &= \frac{\sigma^2 + 2\alpha}{a} \int_0^{\epsilon^{-2t}} \frac{E_2^0(s)}{\beta} ds := \gamma^2 (E_2^0, \frac{2}{\beta}). \end{aligned} \quad (2.58)$$

Inoltre

$$\nu_{\beta, E_2^0}(L_*u)(\omega_s) = \frac{8}{2\alpha + \sigma^2} \left( E_2^0 - \frac{2}{\beta} \right) := \alpha \left( E_2^0, \frac{2}{\beta} \right). \quad (2.59)$$

Dimostriamo come si ottengono esplicitamente questi valori. Per la martingala possiamo riscrivere l'integrando come:

$$\begin{aligned} & \sigma^2(p_{2,1}q_{1,2} - p_{2,2}q_{1,1})^2 + \gamma^2 q_2^2 = \\ & = \frac{4}{a} \sigma^2 \left( \frac{aq_{1,1}^2}{2} \frac{p_{2,1}^2}{2} + \frac{p_{2,2}^2}{2} \frac{aq_{1,2}^2}{2} \right) + \frac{2}{a} \gamma^2 \left( \frac{aq_2^2}{2} \right) - 2\sigma^2 q_{1,1} q_{1,2} p_{2,1} p_{2,2}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

passando alla media otteniamo:

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_{\nu_{\beta, E_2^0}} \left[ \frac{4}{a} \sigma^2 \left( \frac{aq_{1,1}^2}{2} \frac{p_{2,1}^2}{2} + \frac{p_{2,2}^2}{2} \frac{aq_{1,2}^2}{2} \right) + \frac{4}{a} \frac{\alpha}{\beta} \left( \frac{aq_2^2}{2} \right) - 2\sigma^2 q_{1,1} q_{1,2} p_{2,1} p_{2,2} \right] = \\ = \frac{(\sigma^2 + 2\alpha) E_2^0}{a \beta}, \end{aligned} \quad (2.61)$$

dove abbiamo utilizzato l'equazione dell'energia della particella 2,  $E_2^0 = \frac{p_2^2}{2} + a \frac{q_2^2}{2}$  e la (2.62).

Invece il termine  $\alpha(E_2^0, \frac{2}{\beta})$  si ottiene facendo vedere che il momento quadro del termine relativo alla particella 1 converge nel limite  $\epsilon \rightarrow 0$  a

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left[ \epsilon^2 \int_0^{t\epsilon^{-2}} \left( aq_1^2 - \frac{2}{\beta} \right) ds \right]^2 = 0 \quad (2.62)$$

Infatti si può vedere che

$$aq_1^2 = L_0^1 f + \frac{2}{\beta} \quad (2.63)$$

con  $v = -\frac{a+\alpha^2}{2\alpha} q_1^2 - q_1 p_1 - \frac{1}{2\alpha} p_1^2$ , ed  $L_0^1$  solo della particella 1, allora

$$\begin{aligned} & \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left[ \epsilon^2 \int_0^{t\epsilon^{-2}} L_0^1 v(s) ds \right]^2 = \\ & = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left[ \epsilon^2 (v(\epsilon^{-2}) - v(0)) + \epsilon^2 \int_0^{t\epsilon^{-2}} \gamma(\partial_{p_1} v) dw_1 - \epsilon^3 \int_0^{\epsilon^{-2}t} L_* v ds \right]^2 = 0 \end{aligned} \quad (2.64)$$

perchè  $(v(\epsilon^{-2}) - v(0))$  è uniformemente limitata in  $L_2$ , il processo di Wiener per il teorema 2.4.1 è limitato ed infine anche il termine  $L_* v = 2(q_1 - q_2)(q_1 + \frac{p_1}{\alpha})$  è limitato e moltiplicato da  $\epsilon^3$  diventa trascurabile.

Per arrivare alla conclusione abbiamo bisogno di far vedere che  $\alpha$  e  $\gamma$  che vogliamo dipendenti dalla dinamica debolmente accoppiata, convergono in norma  $L^2$  ai coefficienti della dinamica disaccoppiata, utilizzando il seguente lemma:

**Lemma 2.4.3**

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left| \int_0^t (\alpha(E_2^0(\omega_{\epsilon^{-2}s}), \frac{2}{\beta}) - \alpha(E_2^\epsilon(\omega_{\epsilon^{-2}s}), \frac{2}{\beta})) ds \right|^2 = 0, \quad (2.65)$$

e similmente per  $\gamma^2$ .

**Dimostrazione** Per la stazionarietà e per la disuguaglianza di Schwarz abbiamo

$$\begin{aligned} & \mathbb{E}_\epsilon \left| \int_0^t (\alpha(E_2^0(\omega_{\epsilon^{-2}s}), \frac{2}{\beta}) - \alpha(E_2^\epsilon(\omega_{\epsilon^{-2}s}), \frac{2}{\beta})) ds \right|^2 \\ & \leq t m_\epsilon (|\alpha(\frac{2}{\beta}, E_2^0) - \alpha(\frac{2}{\beta}, E_2^\epsilon)|^2) \end{aligned} \quad (2.66)$$

poiché  $\alpha(\frac{2}{\beta}, E_2)$  è uniformemente Lipschitz, segue il risultato.  $\square$

Applicando questo lemma a (2.57) otteniamo che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left( \left| \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2}t} j(s) ds - \int_0^t \alpha(E\epsilon_2(s), \frac{2}{\beta}) ds + M_{\epsilon^{-2}t}^u \right|^2 \right) = 0 \quad (2.67)$$

all'equilibrio, ed usando Schwarz arriviamo al caso generale (2.38). Utilizzando la (2.38) vediamo che l'evoluzione temporale dell'energia  $E_2^\epsilon$  converge in norma  $L^1$  alla martingala  $M_{\epsilon^{-2}t}^u$ , quest'ultima converge in legge alla martingala  $\hat{M}^\epsilon$ , quindi insieme alla (2.58) otteniamo la (2.57). Dunque l'energia  $E_2$  della particella hamiltoniana, per tempi mesoscopici converge rispetto alla misura stazionaria alla soluzione debole dell'equazione differenziale stocastica

$$dE_2 = \frac{8}{a(2\alpha + \sigma^2)} (\frac{2}{\beta} - E_2) dt + \sqrt{\frac{16}{a(2\alpha + \sigma^2)} \frac{E_2}{\beta}} dB \quad (2.68)$$

corrispondente al processo di diffusione dato da

$$L_{E_2} = \frac{8}{a(2\alpha + \sigma^2)} (\frac{2}{\beta} - E_2) \partial_{E_2} + \frac{8}{a(2\alpha + \sigma^2)} \frac{E_2}{\beta} \partial_{E_2}^2. \quad (2.69)$$

### 2.4.3 Unicità del limite

Presentiamo dei risultati [15], che riguardano l'esistenza della soluzione debole di una equazione differenziale stocastica omogenea nel tempo in una dimensione

$$dX_t = b(X_t)dt + \hat{\sigma}(X_t)dW_t \quad (2.70)$$

che possano essere applicati alla nostra SDE (2.68). Nel caso di drift nullo, ovvero  $b = 0$ , abbiamo condizioni necessarie e sufficienti per l'esistenza e l'unicità, nel caso  $b \neq 0$  di drift generico, le condizioni sono solo sufficienti.

Può accadere che la soluzione di una SDE non esista globalmente, ma solo fino ad un "tempo di esplosione", perciò vediamo quali sono le condizioni per un'eventuale esplosione o meno formalizzando l'idea con il "test per l'esplosione" di Feller.

Quando il drift è nullo l'equazione risultante:

$$dX_t = \hat{\sigma}(X_t)dW_t \quad (2.71)$$

non può esplodere, si può dimostrare che (2.71) ha una soluzione debole fino al tempo  $S$  e che  $S = \infty$ . Se invece il termine di drift appare possiamo sempre fare una trasformazione per rimuoverlo, dobbiamo richiedere però che valgano le condizioni di *non degenerazione* e di *integrabilità locale*:

$$\hat{\sigma}^2(E_2) > 0, \quad \forall E_2 \in (0, \infty), \quad (2.72)$$

$$\forall E_2 \in (0, \infty) \quad \exists \epsilon > 0 \quad \text{t.c.} \quad \int_{E_2-\epsilon}^{E_2+\epsilon} \frac{1 + |b(y)|}{\hat{\sigma}^2(y)} dy < \infty. \quad (2.73)$$

Per l'unicità della soluzione utilizziamo il seguente teorema

**Teorema 2.4.4** *Assumiamo che  $\sigma^{-2}$  sia localmente integrabile in ogni punto in  $(0, \infty)$ , e che valgano le condizioni (2.72) e (2.73). Allora per ogni distribuzione iniziale  $\mu$ , l'equazione (2.71) ha una soluzione debole fino al tempo di esplosione, e questa soluzione è unica nel senso della probabilità.*

Nel caso in esame l'unicità è assicurata dalla integrabilità locale di

$$\frac{\beta a(2\alpha + \sigma^2)}{16} \int_1^{E_2} \frac{dx}{x} < +\infty \quad \text{per } E_2 < +\infty. \quad (2.74)$$

Per verificare la non esplosione in un tempo finito applichiamo il *test di Feller* per le esplosioni. Il test richiede che siano valide le ipotesi locali,

sui coefficienti della equazione differenziale stocastica, di non degenerazione (2.72) e di integrabilità, che nel sistema in esame, in cui abbiamo i seguenti valori:

$$\hat{\sigma}^2(E_2) := \frac{16}{a(2\alpha + \sigma^2)} \frac{E_2}{\beta} \quad b(E_2) := \frac{8}{a(2\alpha + \sigma^2)} \left( \frac{2}{\beta} - E_2 \right) \quad (2.75)$$

sono entrambe verificate. Fissiamo un numero  $c \in \mathbb{R}$  e definiamo una funzione di scala

$$p_c(x) = \int_c^x e^{-2 \int_1^\xi \frac{b(\zeta) d\zeta}{\hat{\sigma}^2(\zeta)}} d\xi; \quad x \in \mathbb{R} \quad (2.76)$$

che ha derivata continua e strettamente positiva. La definizione della funzione di scala dipende dal numero  $c$ , ma la finitezza (o non finitezza) di  $p_c(\pm\infty)$  non dipende dalla scelta di  $c$ .

**Teorema 2.4.5 “Test di esplosione di Feller”.**

Assumiamo la non degenerazione e la locale integrabilità dei coefficienti della (2.68), sia  $E_2(t)$  la soluzione debole in  $I = (0, \infty)$ , con condizione iniziale  $E_2(0)$ . Allora la soluzione non esplose in un tempo finito se  $P[\inf t \geq 0 : E_2(t) \notin I = \infty] = 1$  o esplose se  $P[\inf t \geq 0 : E_2(t) \notin I = \infty] < 1$  a seconda che

$$v(0) = v(\infty) = \infty \quad (2.77)$$

o no.

Perciò studiamo la funzione

$$v_{c=1}(E_2) = \int_1^{E_2} p'(y) \left( \int_1^y \frac{2dz}{p'(z)\hat{\sigma}^2(z)} \right) dy \quad (2.78)$$

dove

$$p_{c=1}(E_2) = \int_1^{E_2} e^{-2 \int_1^\xi \frac{b(\zeta) d\zeta}{\hat{\sigma}^2(\zeta)}} d\xi \quad (2.79)$$

e verifichiamo che agli estremi dell'intervallo  $I$  diverga.

Sostituiamo i coefficienti ed otteniamo:

$$p'(E_2) = \frac{e^{\beta(\frac{E_2^2}{2} - \frac{1}{2})}}{E_2^2} \quad (2.80)$$

allora

$$v(E_2) = \int_1^{E_2} dy \frac{e^{\beta \frac{y^2}{2}}}{y^2} \int_1^y \frac{\beta a(2\alpha^2 + \sigma)}{8} e^{-\beta \frac{\xi^2}{2}} \xi d\xi \quad (2.81)$$

che per  $E_2 = 0, \infty$  vale  $v(0) = v(\infty) = \infty$ , quindi la soluzione non esplode in un tempo finito. Abbiamo perciò dimostrato che la soluzione di (2.68) è unica e  $E_2 = 0$  è irraggiungibile.

#### 2.4.4 Comportamento asintotico dell'equazione limite

Mostriamo in questa sezione che la misura invariante del processo limite è unica ed è attrattiva.

Calcoliamo la misura invariante  $\rho_{E_2}$  della dinamica generata da  $L_{E_2}$ , risolvendo l'equazione

$$\int dE_2 \rho(E_2) L_{E_2} f(E_2) = 0, \quad (2.82)$$

per ogni  $f$ , che integriamo per parti ed otteniamo che

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dE_2 L_{E_2}^* \rho_{E_2} f(E_2) &= \int_0^\infty dE_2 \left[ -\partial_{E_2} \left( \frac{2}{\beta} - E_2 \right) \rho_{E_2} + \right. \\ &\quad \left. + \partial_{E_2}^2 \frac{E_2}{\beta} \rho_{E_2} \right] f(E_2) = 0, \end{aligned} \quad (2.83)$$

per cui  $\rho_{E_2}$  deve risolvere l'equazione differenziale ordinaria del secondo ordine

$$\begin{aligned} \partial_{E_2} \left( -\left( \frac{2}{\beta} - E_2 \right) \rho_{E_2} \right) + \partial_{E_2}^2 \left( \frac{E_2}{\beta} \rho_{E_2} \right) &= \\ = \left( -\left( \frac{2}{\beta} - E_2 \right) \rho_{E_2} \right) + \partial_{E_2} \left( \frac{E_2}{\beta} \rho_{E_2} \right) &= c \end{aligned} \quad (2.84)$$

la soluzione per  $c = 0$  è

$$\rho_\infty(E_2) \propto E_2 e^{-\beta E_2}. \quad (2.85)$$

È facile verificare che le soluzioni per  $c \neq 0$  dell'equazione differenziale consistono di funzioni non integrabili, che quindi non possono dare luogo a densità per misure di probabilità.

Verifichiamo che la misura invariante è attrattiva. Sia

$$P_t = e^{L_{E_2} t} \quad (2.86)$$

il semigruppato associato al generatore  $L_{E_2}$ . Definiamo  $f_t = P_t f$  l'evoluto della funzione  $f$  sotto l'azione del semigruppato, con  $f \in L^2(\mu_{E_2})$ , e  $\mu_{E_2}(f) = 0$ .

Calcoliamo il tasso di convergenza del semigruppò  $P_t$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\mathbb{E}_\beta[f_t^2] &= \frac{d}{dt}\beta^2 \int_0^\infty f_t^2 E_2 e^{-\beta E_2} dE_2 = \\
&= \beta^2 \int_0^\infty 2f_t L f_t E_2 e^{-\beta E_2} dE_2 = 2\mathbb{E}_\beta[f_t L f_t] = \\
&= \frac{16}{(2\alpha + \sigma^2)} \mathbb{E}_\beta[f_t \left\{ \left(\frac{2}{\beta} - E_2\right) \partial_{E_2} + \frac{E_2}{\beta} \partial_{E_2}^2 \right\} f_t] = \\
&= \frac{16\beta^2}{(2\alpha + \sigma^2)} \left\{ -\frac{1}{2} \int_0^\infty dE_2 [E_2 e^{-\beta E_2} \left(\frac{2}{\beta} - E_2\right)]' f_t^2 + \frac{1}{2} \int_0^\infty dE_2 [\beta E_2 + \frac{2}{\beta E_2} - 4] E_2 e^{-\beta E_2} f_t^2 + \right. \\
&\quad \left. - \int_0^\infty dE_2 e^{-\beta x} \frac{E_2^2}{\beta} f_t'^2 \right\} = \\
&= -\frac{16\beta}{(2\alpha + \sigma^2)} \int dE_2 E_2 e^{-\beta E_2} E_2 f_t'^2 = \\
&= -\frac{16}{\beta(2\alpha + \sigma^2)} \mathbb{E}_\beta[E_2 f_t'^2].
\end{aligned} \tag{2.87}$$

Ora utilizziamo la disuguaglianza di Poincaré [29]

$$\mathbb{E}_\beta[f_t^2] \leq \beta^{-1} \mathbb{E}_\beta[E_2 (f_t')^2] \tag{2.88}$$

valida per funzioni  $f$  a media nulla  $\mathbb{E}_\beta[f] = 0$ , che si dimostra nel seguente modo:

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_\beta[f^2] &= \beta^4 \int_0^\infty dx \int_x^\infty dy x y e^{-\beta(x+y)} [f(x) - f(y)]^2 = \\
&= \beta^4 \int_0^\infty dx \int_0^\infty dy x y e^{-\beta(x+y)} \left[ \int_x^y f'(z) dz \right]^2 \leq \\
&\leq \beta^4 \int_0^\infty dz f'(z) \int_0^z dx \int_z^\infty dy x y e^{-\beta(x+y)} (x - y) = \\
&= \beta \int_0^\infty dz f'(z) e^{-z\beta} z^2 = \beta^{-1} \mathbb{E}_\beta[x (f')^2].
\end{aligned} \tag{2.89}$$

Sostituiamo la disuguaglianza di Poincaré nella (2.87):

$$\frac{d}{dt}\mathbb{E}_\beta[f_t^2] \leq -\frac{16}{(2\alpha + \sigma^2)} \mathbb{E}_\beta[f_t^2]. \tag{2.90}$$

a cui possiamo applicare il lemma di Gronwall, e troviamo che

$$\mathbb{E}_\beta[f_t^2] \leq \mathbb{E}_\beta[f_0^2] e^{-\frac{16}{(2\alpha+\sigma^2)}t}, \quad (2.91)$$

c'è una convergenza esponenziale della contrazione del semigruppato di Markov  $P_t$ , quindi la dinamica esibisce il “ritorno all'equilibrio” e la misura invariante l'unica misura di equilibrio.



# Capitolo 3

## Il cristallo anarmonico debolmente interagente connesso a due *reservoirs*

### 3.1 Introduzione

Discutiamo il caso di un sistema composto da una catena di  $N$  oscillatori *anarmonici* debolmente interagenti l'uno con l'altro, accoppiata a due *reservoir* agli estremi della catena, posti nei siti 1 ed  $N$ . In generale, nei cristalli isolanti, il calore viene trasportato mediante le vibrazioni reticolari, e fin dai primi lavori sulla conduzione del calore ad opera di Debye, i sistemi di oscillatori anarmonici sono stati usati come modelli microscopici per la conduzione di calore.

Assumiamo inoltre che siano presenti delle forze interne che perturbano la dinamica hamiltoniana mediante un continuo scambio casuale di energia cinetica tra gli oscillatori primi vicini. Questo tipo di forze interne conserva l'energia cinetica totale e distrugge tutte le altre leggi di conservazione, simulando un effetto di non linearità. I fenomeni non lineari sono estremamente importanti per ottenere una conducibilità finita, perché causando gli urti tra i fononi sono responsabili del decadimento delle correlazioni delle correnti di calore. La non linearità permette di ottenere quella caoticità e quel mixing necessari affinché localmente il sistema, alla scala macroscopica, sia in uno stato di locale equilibrio.

Se nel caso di un singolo *reservoir* ci potevamo aspettare a priori che

lo stato finale corrispondesse ad un “ritorno all’equilibrio”, verso lo stato di Gibbs a quella singola temperatura; nel caso di due *reservoir* non possiamo fare delle predizioni su come si debba presentare lo stato stazionario di non equilibrio, ma dobbiamo fare delle ipotesi di esistenza, se possibile anche di unicità dello stato stazionario. il nostro sistema è collegato a dei *reservoir* stocastici, modellizzati da dei processi di Ornstein Uhlenbeck alle due differenti temperature  $T_1 = \frac{1}{\beta_1}$  e  $T_2 = \frac{1}{\beta_2}$ .

### 3.2 Il modello

Il sistema è descritto dalla seguente hamiltoniana nelle variabili  $(q_i, p_i) \in \Lambda$ , dove  $\Lambda = 1, \dots, N$  è la catena di oscillatori anarmonici.

$$H_\epsilon^\Lambda = \sum_{i \in \Lambda} \frac{1}{2} \|p_i\|^2 + \sum_{i \in \Lambda} U(q_i) + \epsilon \frac{1}{2} \sum_{|i-j|=1} V(q_i - q_j), \quad (3.1)$$

dove  $U, V \in C^\infty(\mathbb{R}^\nu, \mathbb{R})$ .

Per semplicità assumiamo che  $U(q) = \bar{U}(|q|^2)$ ,  $\bar{U} \in C^\infty(\mathbb{R}, \mathbb{R})$ ,  $\bar{U}(0) = 0$  e  $c^{-1} \leq \bar{U}' \leq c$  per qualche costante positiva  $c$ , quindi abbiamo scelto  $U$  radialmente simmetrica e strettamente convessa. Assumiamo anche che  $\|\nabla V(q)\|^2 \leq cU(q)$  e  $V(-q) = V(q)$ .

Le equazioni del moto sono :

$$\begin{aligned} dq_1 &= p_1 dt, & dp_1 &= -\nabla_{q_1} U dt - \alpha_1 p_1 dt + \sqrt{\frac{2\alpha_1}{\beta_1}} dw_1 - \epsilon \nabla_{q_1} V dt, \\ dq_j &= p_j dt, & dp_j &= -\nabla_{q_j} U dt - \frac{\sigma^2}{2} p_j dt + \sigma (J p_j) dw_j - \epsilon \nabla_{q_j} V dt \quad j \in \{2, \dots, N-1\}, \\ dq_N &= p_N dt, & dp_N &= -\nabla_{q_N} U dt - \alpha_N p_N dt + \sqrt{\frac{2\alpha_N}{\beta_N}} dw_N - \epsilon \nabla_{q_N} V dt, \end{aligned} \quad (3.2)$$

Oltre alla dinamica hamiltoniana assumiamo che siano presenti delle forze casuali, che conservino le energie cinetiche dei singoli siti, e che siano date da diffusioni indipendenti sulle singole sfere  $\|p_j\|^2 = \text{cost}$ . Per definire questo tipo di diffusioni, consideriamo i campi vettoriali:

$$X_j = p_j^1 \partial_{p_j^2} - p_j^2 \partial_{p_j^1} = J p_j \cdot \partial_{p_j}, \quad J = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

e l'operatore al secondo ordine

$$S = \sum_{j=2}^{N-1} X_j^2. \quad (3.4)$$

Il generatore di questo modello è dato da

$$L_{\epsilon,N} = A_{\epsilon} + \sigma^2 S + \sum_{i=1,N} (-\alpha_i p_i \nabla_{p_i} + \frac{1}{\beta_i} \Delta_{p_i}) \quad (3.5)$$

dove  $A_{\epsilon} = \{H_{\epsilon}^{\Lambda}, \cdot\}$  è l'operatore hamiltoniano e  $\sigma > 0$  misura l'intensità del rumore.  $L_{\epsilon,N}$  è il generatore del semigruppò  $P_{\epsilon}^t$  in  $L^2(\mathbb{R}^{2N}, m_{\epsilon}^{\beta'})$ .

Il vero problema d'interesse è l'esistenza o meno della misura invariante di questo modello. Nel caso in cui i *reservoir* fossero alla stessa temperatura  $\beta = \beta_1 = \beta_N$ , il problema di esistenza sarebbe banale, proprio perché i *reservoir* sono scelti in maniera tale da lasciare la distribuzione canonica di Gibbs invariata sotto evoluzione temporale. Infatti in questo caso viene trasmessa al sistema abbastanza energia da permettere che la sua distribuzione iniziale converga allo stato stazionario dato dalla distribuzione di Gibbs:

$$Z^{-1} e^{-\beta H_{\Lambda}} dpdq \quad (3.6)$$

Non sono banali i problemi di unicità e di convergenza all'equilibrio.

Nel caso presente invece, le temperature dei *reservoir* sono diverse, quindi in linea di principio si può estrarre un'infinita quantità di energia che viene trasmessa al sistema da *reservoir* a *reservoir*. Facendo ciò, si può mantenere il sistema in uno stato stazionario (indipendente dal tempo) di non equilibrio in cui c'è un flusso di energia, però anche l'esistenza dello stato stazionario di non equilibrio matematicamente è un problema non banale.

Per  $\epsilon = 0$ , nel caso disaccoppiato la misura stazionaria  $\nu_{E_i, \beta_1, \beta_N}$  è data dal prodotto delle misure canoniche dei *reservoir* alle temperature  $\beta_1$  e  $\beta_N$ ,  $m_{\beta_1}$ ,  $m_{\beta_N}$  per le misure microcanoniche  $\mu_{E_i}$  degli oscillatori non interagenti.

Inizialmente il sistema ha la distribuzione:

$$d\nu_0 = F_{\epsilon} dm_{\epsilon}^{\beta'} = F_0 dm_0 \quad (3.7)$$

**Ipotesi** Assumiamo che  $F_0 \in L^2(\mathbb{R}^{4N}, m_0)$ .

Per ogni  $T > 0$ , il processo di Markov appena descritto definisce una probabilità su  $\Omega = C^0([0, T], \mathbb{R}^{2\nu|\Lambda|})$ . Useremo  $\omega_t = (q(t), p(t))$  per designare gli elementi di  $\Omega$  al tempo  $t$ .

### 3.2.1 L'evoluzione mesoscopica

Le energie delle singole particelle sono

$$E_i^\epsilon(q, p) = \frac{1}{2}\|p_i\|^2 + U(q_i) + \frac{1}{2}\epsilon \sum_{|i-j|=1} V(q_i - q_j). \quad (3.8)$$

Dall'evoluzione temporale delle energie

$$\begin{aligned} \partial_t E_i &= \epsilon \sum_{|i-k|=1} j_{i,k} \quad i, k \in \{2, \dots, N-1\} \\ \partial_t E_1 &= \epsilon j_{1,2} - \gamma_1 \left( p_1^2 - \frac{1}{\beta_1} \right) + \sqrt{\frac{2\gamma_1}{\beta_1}} w_1 \\ \partial_t E_N &= \epsilon j_{N-1,N} - \gamma_N \left( p_N^2 - \frac{1}{\beta_N} \right) + \sqrt{\frac{2\gamma_N}{\beta_N}} w_N \end{aligned} \quad (3.9)$$

ricaviamo le correnti di energia del bulk hamiltoniano:

$$j_{i,k} = \frac{1}{2} \nabla V(q_i - q_k) \cdot (p_i + p_k), \quad j, k = 2, \dots, N, \quad (3.10)$$

la corrente è antisimmetrica  $j_{i,k} = -j_{k,i}$  sotto scambio di indici ed è funzione di  $q_i, p_i, q_k, p_k$ .

Siamo interessati a determinare le energie, che sono variabili casuali, riscalate nel tempo  $\epsilon^{-2}t$ :

$$E_i^\epsilon(t) = E_i^\epsilon(q(\epsilon^{-2}t), p(\epsilon^{-2}t)). \quad (3.11)$$

Congetturiamo che vale il seguente teorema,

**Teorema 3.2.1** *Nel limite  $\epsilon \rightarrow 0$ , le leggi di  $\{E_i^\epsilon\}_{i \in \Lambda}$  convergono alle soluzioni deboli delle equazioni differenziali stocastiche*

$$\begin{aligned} dE_i &= \sum_{|i-j|=1} \alpha(E_i, E_j) dt + \sum_{|i-j|=1} \gamma(E_i, E_j) dB_{ij}, \quad i, j = 3, \dots, N-2, \\ dE_2 &= \alpha\left(E_2, \frac{2}{\beta_1}\right) dt + \alpha(E_3, E_2) dt + \gamma\left(E_2, \frac{2}{\beta_1}\right) dB_{1,2} + \gamma(E_2, E_3) dB_{2,3} \\ dE_{N-1} &= \alpha\left(E_{N-1}, \frac{2}{\beta_N}\right) dt + \alpha(E_{N-2}, E_{N-1}) dt + \\ &+ \gamma\left(E_{N-1}, \frac{2}{\beta_2}\right) dB_{N-1,N} + \gamma(E_{N-1}, E_{N-2}) dB_{N-1,N-2} \end{aligned} \quad (3.12)$$

con  $B_{i,k} = -B_{k,i}$  moti browniani standard indipendenti. Dove la legge di  $E_i(0)$  con  $i = 3, \dots, N-1$  è data dalla distribuzione marginale di  $F_\epsilon dm_\epsilon$  su  $E^\epsilon$

Il generatore della diffusione (3.12) su  $\mathbb{R}_+^\Lambda$  è dato da

$$L = \sum_{|k-i|=1, i \in \{2, \dots, N-1\}} \gamma(E_i, E_k)^2 (\partial_{E_i} - \partial_{E_k})^2 + \sum_{|k-i|=1} \alpha(E_i, E_k) (\partial_{E_i} - \partial_{E_k}). \quad (3.13)$$

Per dimostrare la congettura 3.2.1, bisogna usare le forti proprietà locali di mixing (*ipocoercitività*) della dinamica microscopica  $P_\Lambda^t$  generata da  $L_{0,\Lambda}$ .

Studiamo, come nel caso di due particelle, l'evoluzione dell'energia per tempi mesoscopici, sia delle particelle nel bulk hamiltoniano che delle due particelle reservoirs.

### 3.2.2 Tightness

Dimostriamo che i processi stocastici  $\{E_i^\epsilon(t)\}_{i \in \Lambda} \in C^0([0, T], \mathbb{R})$  nella misura  $m_\epsilon^{\beta'}$  convergono debolmente alle soluzioni delle equazioni differenziali stocastiche della congettura 3.2.1.

**Ipotesi 3.2.1.1** *Supponiamo che  $\exists C > 0$  tale che*

$$\mathbb{E}[E_i^\epsilon(t)^4] \leq C \quad \forall t \leq T \quad (3.14)$$

*Inoltre detta  $u_{ik}$  la soluzione della equazione di Poisson  $L_{\epsilon,N} j_{i,k}$*

*assumiamo che soddisfi*

$$\begin{aligned} |u_{ik}| &\leq C(E_i + E_k), \\ |\gamma \partial_p u_{ik}| &\leq C(E_i + E_k), \\ |L_* u_{ik}| &\leq C(E_i + E_k). \end{aligned} \quad (3.15)$$

**Lemma 3.2.2** *Sotto le ipotesi di cui sopra, esiste un  $\epsilon_0 > 0$  tale che per ogni  $T > 0$ , i processi  $\{E_i^\epsilon(t)\}_{t \leq T}$ ,  $0 \leq \epsilon \leq \epsilon_0$ , sono tight.*

Verifichiamo come per il caso a due particelle che siano valide le condizioni per il criterio di Kolmogorov, che qui riportiamo:

$$\sup_{\epsilon} \mathbb{E}(|E_2^\epsilon(s) - E_2^\epsilon(t)|^4) \leq C(t-s)^2. \quad \forall t, s \in [0, T] \quad (3.16)$$

per il momento quarto della distribuzione, ovvero che esistano delle costanti  $\beta, \gamma, C > 0$ , tali che:

1.  $\sup_{\epsilon} \mathbb{E}[|E^{\epsilon}(0)|^{\nu}] < \infty$ ;
2.  $\sup_{\epsilon} \mathbb{E}[|E^{\epsilon}(t) - E^{\epsilon}(s)|^4] \leq C|t - s|^{1+\beta}$  per ogni  $t, s \in [0, T]$ .

**Dimostrazione** Verifichiamo la tightness dell'energia della singola particella per tempi diffusivi, ripetendo l'argomento della sezione (2.4.1)

$$\begin{aligned}
 & \mathbb{E} \left[ (E_i(\epsilon^{-2}s) - E_i(\epsilon^{-2}t))^4 \right] = \\
 & = \epsilon^4 \mathbb{E} \left[ \left( \sum_{|i-k|=1} \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} j_{ik}(\eta) d\eta \right)^4 \right] = \\
 & = \epsilon^4 \sum_{|i-k|=1} \mathbb{E} \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} L_{\epsilon} u_{ik} - \epsilon L_* u_{ik}(\eta) d\eta \right)^4 \right] = \\
 & = \epsilon^4 \sum_{|i-k|=1} \mathbb{E} \left[ \left( u_{ik}(\epsilon^{-2}s) - u_{ik}(\epsilon^{-2}t) - \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} \gamma_1 \partial_{p_1} u_{ik} \cdot dw_1 + \right. \right. \\
 & \quad \left. \left. - \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} \gamma_N \partial_{p_N} u_{ik} \cdot dw_N - \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} \sigma(Jp_i) \cdot \partial_{p_i} u dw_i - \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} L_* u_{ik} ds \right)^4 \right] \leq \\
 & \leq 64\epsilon^4 \sum_{|i-k|=1} (\mathbb{E} [(u_{ik}(s) - u_{i,k}(t))^4] + \\
 & + \epsilon^4 \mathbb{E} \left[ \left( \int_t^s \gamma \partial_{p_1} u_{ik} \cdot dw_1 \right)^4 \right] + \\
 & + \epsilon^4 \mathbb{E} \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} \sigma(Jp_i) \cdot \partial_{p_i} u dw_i \right)^4 \right] + \\
 & + \epsilon^8 \mathbb{E} \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} L_* u_{ik} d\eta \right)^4 \right]) \leq 64(I + II + III + IV)
 \end{aligned} \tag{3.17}$$

Stimiamo termine a termine:

$$\begin{aligned}
 & \epsilon^4 \mathbb{E} [(u_{ik}(\epsilon^{-2}s) - u_{ik}(\epsilon^{-2}t))^4] \leq \\
 & \leq \epsilon^4 C \{ \mathbb{E}[u_{ik}(\epsilon^{-2}s)^4] + \mathbb{E}[u_{ik}(\epsilon^{-2}t)^4] \} \leq \\
 & \leq \epsilon^4 C \mathbb{E}[(E_T^{\epsilon})^4] \leq \\
 & \leq C(t - s)^2 = I
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

se assumiamo che il momento quarto dell'energia totale  $E_T^\epsilon$  rimane limitato per un tempo dell'ordine  $\epsilon^{-2}$ . Per quanto riguarda le martingale utilizziamo il teorema 2.4.1, quindi:

$$\begin{aligned} \epsilon^4 \mathbb{E} \left[ \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} \gamma_l \partial_{p_l} u_{ik} \cdot dw_l \right]^4 &\leq \\ &\leq 6\epsilon^2 \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} \mathbb{E}[\gamma_l \partial_{p_l} u_{ik}]^4 d\eta \leq \\ &\leq C_3(t-s)^2 = II; \end{aligned} \tag{3.19}$$

con  $l = 1, N$ , ed anche

$$\begin{aligned} \epsilon^4 \mathbb{E} \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} \sigma(Jp_i) \cdot \partial_{p_i} u_{ik} dw_i \right)^4 \right] & \\ \leq 6\epsilon^2 \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} \mathbb{E}[\sigma(Jp_i) \cdot \partial_{p_i} u_{ik}]^4 d\eta & \\ \leq C_4(t-s)^2 = III; \end{aligned} \tag{3.20}$$

infine

$$\begin{aligned} \epsilon^8 \mathbb{E} \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} L_* u_{ik} ds \right)^4 \right] &\leq (t-s)^4 \mathbb{E} \left[ \left( \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} L_* u \frac{ds}{\epsilon^{-2}(t-s)} \right)^4 \right] \leq \\ &\leq (t-s)^4 \mathbb{E} \left[ \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} (L_* u_{ik})^4 \frac{ds}{\epsilon^{-2}(t-s)} \right] = \\ &= \epsilon^2 (t-s)^3 \int_{\epsilon^{-2}t}^{\epsilon^{-2}s} \mathbb{E} [(L_* u_{ik})^4] ds \leq \\ &\leq C_5(t-s)^4. \end{aligned} \tag{3.21}$$

Una volta dimostrata la *tightness*, sappiamo che esiste una sottosuccessione convergente, quindi nella prossima sezione dobbiamo caratterizzare il limite e verificare che è unico.

### 3.2.3 Identificazione del limite

Vogliamo dimostrare che qualsiasi punto di accumulazione dell'evoluzione delle energie  $\{E_i^\epsilon(t)\}_{i=2,\dots,N-1}$  deve soddisfare l'equazione (3.12). Poiché l'unicità della soluzione dell'equazione di diffusione (3.12) deriva dalla regolarità dei coefficienti  $\alpha$  e  $\gamma$  applicando i risultati in [11], di conseguenza si ha che il processo ha un unico punto di accumulazione, il che dimostra l'esistenza del limite.

Caratterizziamo il limite della sequenza dell'energia al tempo  $\epsilon^{-2}t$ ,  $E^\epsilon(t) := E(\epsilon^{-2}t)$ .

$$E_i^\epsilon(t) - E_i^\epsilon(0) = \sum_{|i-k|=1} \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2}t} j_{ik}(s) ds \quad (3.22)$$

come la soluzione della (3.12):

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_F^\epsilon \left( \left| \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2}t} j_{ik}(s) ds - \int_0^{\epsilon^{-2}t} \alpha(E_i^\epsilon(s), E_k^\epsilon(s)) ds + M_{ik, \epsilon^{-2}t}^u \right| \right) = 0 \quad (3.23)$$

dimostrando che per ogni coppia  $i, k \in \Lambda$  tale che  $|i - k| = 1$  esiste una martingala  $M_{ik, \epsilon^{-2}t}^u$ , a media nulla e varianza quadratica

$$2 \int_0^{\epsilon^{-2}t} \gamma^2(E_i^\epsilon(s), E_k^\epsilon(s)) ds. \quad (3.24)$$

Per dimostrare questo risultato, denotiamo con  $\omega_s = (q(s), p(s))$ , una traiettoria e scriviamo:

$$\begin{aligned} \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2}t} j_{ik}(s) ds &= \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2}t} [L_\epsilon u_{ik} - \epsilon L_* u_{ik}](\omega_s) ds = \\ &= \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2}t} [\epsilon u_{ik}(\omega_{\epsilon^{-2}t}) - \epsilon u_{ik}(\omega_0) - M_{i,k}^\epsilon(t) - \epsilon L_* u_{ik}](\omega_s) ds \end{aligned} \quad (3.25)$$

dove

$$L_* f = \frac{1}{2} \sum_{|i-k|=1} \nabla V(q_i - q_k) \cdot (\partial_{p_i} - \partial_{p_j}) f = \sum_{|i-k|=1} \nabla V(q_i - q_k) \cdot \partial_{p_i} f \quad (3.26)$$

ed abbiamo introdotto la martingala

$$M_{ik, \epsilon^{-2}t}^u = \epsilon u_{ik}(\omega_{\epsilon^{-2}t}) - \epsilon u_{ik}(\omega_0) - \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2}t} L_\epsilon u_{ik}(\omega_s) ds. \quad (3.27)$$



La variazione quadratica della martingala  $M_{ik,\epsilon^{-2}t}^u$  è

$$\begin{aligned} \langle\langle M_{ik,\epsilon^{-2}t}^u M_{i'k',\epsilon^{-2}t}^u \rangle\rangle &= \sum_j \epsilon^2 \int_0^{\epsilon^{-2}t} [2\sigma^2(X_j u_{ik})(X_j u_{i'k'}) (\omega_s) + \\ &\quad + \gamma_1^2(\partial_{p_1} u_{ik})(\partial_{p_1} u_{i'k'}) + \gamma_N^2(\partial_{p_N} u_{ik})(\partial_{p_N} u_{i'k'})] (\omega_s) ds. \end{aligned} \quad (3.28)$$

Per chiudere le equazioni di evoluzione nel limite di  $\epsilon \rightarrow 0$  dobbiamo dimostrare che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left| \epsilon^2 \int_0^{\epsilon^{-2}t} [L_\epsilon u_{ik}(\omega_s) - \nu_{E^0, \beta_1, \beta_N}(L_* u_{ik})(\omega_s)] ds \right|^2 = 0 \quad (3.29)$$

e che

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left| \sum_j \epsilon^2 \int_0^{\epsilon^{-2}t} [2\sigma^2(X_j u_{i'k'}) (\omega_s) + \gamma_1^2(\partial_{p_1} u_{ik})(\partial_{p_1} u_{i'k'}) + \right. \\ \left. + \gamma_N^2(\partial_{p_N} u_{ik})(\partial_{p_N} u_{i'k'}) - \nu_{E^0, \beta_1, \beta_N} \left( \sum_j \epsilon^2 \int_0^{\epsilon^{-2}t} [2\sigma^2(X_j u_{ik})(X_j u_{i'k'}) (\omega_s) + \right. \right. \\ \left. \left. + \gamma_1^2(\partial_{p_1} u_{ik})(\partial_{p_1} u_{i'k'}) + \gamma_N^2(\partial_{p_N} u_{ik})(\partial_{p_N} u_{i'k'}) \right)] (\omega_s) ds \right|^2 = 0 \end{aligned} \quad (3.30)$$

La convergenza è una conseguenza del fatto che per l'ipoellitticità [20] dell'operatore  $L_0$  esiste una soluzione  $u \in C^\infty$  e del fatto che  $L_* u \in L^2(\mathbb{R}, m_0)$ , ora non possiamo usare il lemma 2.4.2, ma sembra comunque ragionevole che si possa ottenere questo risultato.

Abbiamo ottenuto che

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left( \left| \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2}t} (j_{ik}(s) - \epsilon \nu_{E^0, \beta_1, \beta_2}(L_* u_{i,k})) ds - M_{ik}^\epsilon(t) \right|^2 \right) = 0 \quad (3.31)$$

dove  $M_{ik}(t)$  converge alla variazione quadratica della martingala  $\hat{M}_{ik}$  con variazione quadratica data da

$$\begin{aligned} \langle\langle \hat{M}_{ik}(t), \hat{M}_{i'k'}(t) \rangle\rangle &= \nu_{E^0, \beta_1, \beta_N} \left[ \sum_j \epsilon^2 \int_0^{\epsilon^{-2}t} (2\sigma^2(X_j u_{ik})(X_j u_{i'k'}) + \right. \\ &\quad \left. + \gamma_1^2(\partial_{p_1} u_{ik})(\partial_{p_1} u_{i'k'}) + \gamma_N^2(\partial_{p_N} u_{ik})(\partial_{p_N} u_{i'k'})) \right] \end{aligned} \quad (3.32)$$

Definiamo le seguenti quantità:

$$\nu_{E^0, \beta_1, \beta_N}(L_* u_{ik}) := \alpha(E_i, E_k); \quad (3.33)$$

e

$$\nu_{E^0, \beta_1, \beta_N}[\sigma^2(X_i u_{ik})^2 + \gamma_1^2(\partial_{p_1} u_{ik})^2 + \gamma_N^2(\partial_{p_N} u_{ik})^2] := \gamma^2(E_i, E_k) \quad (3.34)$$

Applicando il lemma 2.4.3 a (3.31) otteniamo

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_\epsilon \left( \left| \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2t}} (j_{ik}(s) - \int_0^t \alpha(E_i(s), E_k(s)) ds + M_{ik, \epsilon^{-2t}}^u) \right|^2 \right) = 0. \quad (3.35)$$

Il caso generale

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \mathbb{E}_F \left( \left| \epsilon \int_0^{\epsilon^{-2t}} (j_{ik}(s) - \int_0^t \alpha(E_i(s), E_k(s)) ds + M_{ik, \epsilon^{-2t}}^u) \right|^2 \right) = 0. \quad (3.36)$$

deriva dalla disuguaglianza di Schwarz, e dalla (3.32) segue il risultato.

### 3.2.4 Ipocoercitività

Un fatto fondamentale usato nel precedente schema di dimostrazione sono le proprietà della soluzione dell'equazione di Poisson

$$L_0 u_{i,k} = j_{i,k}. \quad (3.37)$$

Posta l'esistenza di un gap spettrale per il generatore della dinamica disaccoppiata:

$$L_0 = L_{0,1}^{\beta_1} + \sum_{i=2}^{N-1} L_{0,i} + L_{0,N}^{\beta_N} \quad (3.38)$$

segue l'esistenza e l'unicità della  $u_{ik}$ . L'operatore  $L_0$  genera un processo di diffusione degenera, perché il rumore agisce solo sugli impulsi, ma c'è un'interazione tra i gradi di libertà affinché il rumore si trasmetta a tutte le variabili.

Il generatore  $L_0$  può essere decomposto in  $L_0 = L_I + L_B$ , come generatore del sistema+bordo. All'operatore  $L_I$  del sistema applichiamo la teoria sviluppata in [25], invece per  $L_B$  riscritto nella "forma di Hormander"

$$L = B + A^* A, \quad (3.39)$$

possiamo applicare la teoria di C.Villani dell'ipocoercitività [37]. in entrambi i casi gli operatori hanno un gap spettrale, quindi sembra ragionevole assumere che  $L_0$  abbia un gap in un opportuno spazio  $\mathcal{H}_1$ . Inoltre stime analoghe a quelle dimostrate in [25] dovrebbero dimostrare le assunzioni precedenti su  $u_{ik}$  di limitatezza e regolarità.

La teoria dell'ipocoercitività descrive il fenomeno della convergenza allo stato stazionario in riguardo ai molti casi della fisica matematica in cui le equazioni evolutive dissipative coinvolgono due operatori: uno dissipativo degenere, l'altro conservativo che preserva delle proprietà di simmetria. Presi insieme questi operatori implicano la convergenza verso un unico stato stazionario, anche se tipicamente, la parte dissipativa, non è coerciva, ovvero non ammette un gap spettrale; bensì possiede un grande kernel, che non è stabile sotto l'azione della parte conservativa. Il problema su cui l'ipocoercitività si concentra è identificare la struttura generale nella quale l'interazione tra la parte conservativa e la parte dissipativa degenere porta il sistema all'equilibrio.

Sia  $L$  un operatore illimitato su  $\mathcal{H}$  con kernel  $\mathcal{K}$  e sia  $\tilde{\mathcal{H}}$  immerso con continuità e densamente in  $\mathcal{K}^\perp = \mathcal{H}/\mathcal{K}$ ,  $L$  è coercitivo su  $\tilde{\mathcal{H}}$ , se e solo se

$$\|e^{-tL}h_0\|_{\tilde{\mathcal{H}}} \leq e^{-\lambda t}\|h_0\|_{\tilde{\mathcal{H}}}\forall h_0 \in \tilde{\mathcal{H}}, t \geq 0. \quad (3.40)$$

$L$  è ipocoercitivo su  $\tilde{\mathcal{H}}$  se esiste una costante  $C \geq 1$  tale che

$$\|e^{-tL}h_0\|_{\tilde{\mathcal{H}}} \leq Ce^{-\lambda t}\|h_0\|_{\tilde{\mathcal{H}}}\forall h_0 \in \tilde{\mathcal{H}}, t \geq 0. \quad (3.41)$$

A differenza della coercitività, l'ipocoercitività è invariante sotto cambiamento di norma equivalente.

### 3.3 Caso armonico di due *reservoir*

Studiamo in questa sezione il caso di  $N$  particelle armoniche che interagisce con due *reservoirs* a due temperature diverse  $\beta_1$  e  $\beta_N$ , se il teorema 3.2.1 è verificato allora possiamo trovare esplicitamente la misura invariante  $\rho(E_2; \beta_1, \beta_N)$ .

L'energia della  $i$ -esima particella è data da:

$$E_i^\epsilon = \frac{1}{2}p_i^2 + a\frac{q_i^2}{2} + \frac{1}{2}\epsilon(q_i - q_{i+1})^2 + \frac{1}{2}\epsilon(q_{i-1} - q_i)^2 \quad (3.42)$$

da cui ricaviamo che l'evoluzione dipende dalla somma delle correnti dei *reservoirs*

$$\partial_t E_i^c = \epsilon(j_{i-1,i} + j_{i+1,i}). \quad (3.43)$$

Quindi possiamo ripetere gli argomenti utilizzati nella sezione 2.4.2 ed estenderli al caso di due sorgenti di calore, trovando un'equazione limite:

$$\begin{aligned} dE_2 &= \hat{\sigma}_1 \left( \frac{2}{\beta_1} - E_2 \right) dt + \hat{\sigma}_3 (E_3 - E_2) dt + \sqrt{2\hat{\sigma}_1 \frac{E_2}{\beta_1}} dB_{12} + \sqrt{2\hat{\sigma}_3 E_2 E_3} dB_{23} \\ dE_i &= \hat{\sigma}_{i-1} (E_{i-1} - E_i) dt + \hat{\sigma}_{i+1} (E_{i+1} - E_i) dt + \\ &\quad + \sqrt{2\hat{\sigma}_{i-1} E_i E_{i-1}} dB_{1,i-1} + \sqrt{2\hat{\sigma}_{i+1} E_{i+1} E_i} dB_{i,i+1} \\ dE_{N-1} &= \hat{\sigma}_{N-2} (E_{N-2} - E_{N-1}) dt + \hat{\sigma}_N \left( \frac{2}{\beta_N} - E_{N-1} \right) dt + \\ &\quad + \sqrt{2\hat{\sigma}_{N-2} E_{N-2} E_{N-1}} dB_{N-2,N-1} + \sqrt{2\hat{\sigma}_N \frac{E_{N-1}}{\beta_N}} dB_{N-1,N} \end{aligned} \quad (3.44)$$

dove  $\hat{\sigma}$  dipende dalla costante di *pinning*  $a$ , dall'intensità  $\sigma$  del rumore stocastico e da  $\alpha$  il parametro del *reservoir*.

Il generatore relativo a questo processo è

$$L_E(\beta_1, \beta_N) = L_2 + \sum_{i=3}^{N-2} L_i + L_{N-1}, \quad (3.45)$$

dove

$$\begin{aligned} L_2 &= \left[ \hat{\sigma}_1 \left( \frac{2}{\beta_1} - E_2 \right) + \hat{\sigma}_3 (E_3 - E_2) \right] \partial_{E_2} + \left[ \hat{\sigma}_1 \frac{E_2}{\beta_1} + \hat{\sigma}_3 E_2 E_3 \right] \partial_{E_2}^2 \\ L_i &= \left[ \hat{\sigma}_{i-1} (E_{i-1} - E_i) + \hat{\sigma}_{i+1} (E_{i+1} - E_i) \right] \partial_{E_i} + \left[ \hat{\sigma}_{i-1} E_i E_{i-1} + \hat{\sigma}_{i+1} E_{i+1} E_i \right] \partial_{E_i}^2 \\ L_{N-1} &= \left[ \hat{\sigma}_{N-2} (E_{N-2} - E_{N-1}) + \hat{\sigma}_N \left( \frac{2}{\beta_N} - E_{N-1} \right) \right] \partial_{E_{N-1}} + \left[ \hat{\sigma}_{N-2} E_{N-2} E_{N-1} + \hat{\sigma}_N \frac{E_{N-1}}{\beta_N} \right] \partial_{E_{N-1}}^2 \end{aligned} \quad (3.46)$$

Calcoliamo la misura invariante per il caso semplice di una particella connessa con due termostati

$$\int dx L_x^*(\beta_1, \beta_N) \rho(x) = 0 \quad (3.47)$$

e troviamo che

$$\rho(E; \beta_1, \beta_N) = E e^{-\beta_1 \beta_N \frac{(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_N)}{\beta_3 \hat{\sigma}_1 + \beta_N \hat{\sigma}_N} E} \quad (3.48)$$

è la misura invariante.

### 3.3.1 La legge di Fourier

Ricaviamo la Legge di Fourier relativa al processo (3.44). Consideriamo una particella  $i$  situata tra la particella  $i - 1$  e la particella  $i + 1$ , e studiamo l'evoluzione temporale del valore aspettato dell'energia  $E_i$ , a meno delle costanti:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathbb{E}_i &= \mathbb{E}(E_{i-1} - E_i) + \mathbb{E}(E_i - E_{i+1}) = \\ &= \mathbb{E}(E_{i-1} - E_{i+1}) = j_i \end{aligned} \quad (3.49)$$

quindi la corrente totale è

$$\sum_{i=1}^N \mathbb{E}(E_{i+1} - E_i) = \mathbb{E}(E_N - E_1) = \frac{2}{\beta_N} - \frac{2}{\beta_1} = Nj \quad (3.50)$$

allora semplicemente otteniamo:

$$j = \frac{T_N - T_1}{N}, \quad (3.51)$$

nel caso lineare con *reservoir* ai bordi la Legge di Fourier si verifica immediatamente.

# Conclusioni

Uno degli obiettivi della meccanica statistica del non equilibrio è la derivazione di leggi macroscopiche a partire da semplici modelli microscopici. Generalmente per descrivere fenomeni del non equilibrio si definiscono dei coefficienti di trasporto attraverso equazioni fenomenologiche costitutive, e sotto l'ipotesi di equilibrio locale, si può postulare la proporzionalità tra i flussi e le forze termodinamiche. Nel caso della conduzione di calore in un solido si definisce la conducibilità  $k$ , attraverso la legge di Fourier

$$J(x) = -k(x)\nabla T(x). \quad (3.52)$$

La legge di Fourier è stata osservata sperimentalmente in molti materiali, dai gas ai solidi, a basse ed a alte temperature. D'altra parte la derivazione di questa legge a partire da principi primi ancora ad oggi sembra una sfida impossibile. Le quantità  $T$  e  $J$  sono variabili macroscopiche, medie statistiche delle variabili che descrivono la dinamica microscopica. Una derivazione a partire dai principi primi richiede che  $T$  e  $J$  vengano definiti in termini delle variabili microscopiche e che la legge si dimostri in un limite appropriato. Un esempio di una situazione fisica idealizzata di un cristallo isolante, in cui il calore viene trasportato attraverso le vibrazioni reticolari è un sistema di oscillatori anarmonici debolmente interagenti. Gli oscillatori anarmonici sono stati utilizzati come modello microscopico fin dai lavori pionieristici di Debye. Consideriamo questo sistema in presenza di forze stocastiche, conservative dell'energia, che agiscono sui singoli oscillatori, queste forze creano degli effetti non lineari estremamente importanti per ottenere una conducibilità finita. Accoppiati alle estremità del sistema, vi sono due *reservoir*, modellizzati da processi di Ornstein Uhlenbeck a differenti temperature, che creano il flusso stazionario di energia. Gli oscillatori interagiscono debolmente tra di loro attraverso un parametro  $\epsilon$  piccolo, di conseguenza gli oscillatori si scambiano energia tramite una corrente moltiplicata per  $\epsilon$ . In un tempo

dell'ordine  $\epsilon^{-2}$  le fluttuazioni della corrente muovono l'energia attraverso tutto il cristallo, allora vogliamo dimostrare che in questo ordine di tempo l'energie degli atomi evolvono autonomamente seguendo la soluzione di un sistema differenziale stocastico. È stato possibile studiare esplicitamente il caso di due particelle, una hamiltoniana e l'altra di Ornstein Uhlenbeck, che giocano rispettivamente i ruoli di sistema e di *reservoir*, dimostrando che in questo caso è possibile calcolare l'equazione limite e la misura invariante. L'intento successivo è stato quello di generalizzare il caso di due oscillatori ad una catena di  $N - 1$  oscillatori anarmonici debolmente interagenti connessi a due *reservoir* stocastici, ed utilizzare la stessa strategia nella dimostrazione della dinamica mesoscopica. Le fluttuazioni della corrente rispetto alla dinamica disaccoppiata, per tempi  $\epsilon^{-2}t$  muovono l'energia nel sistema. Dobbiamo studiare un teorema del limite centrale per l'equazione di Poisson  $L_0 u = j$ , dove  $L_0$  è il generatore della dinamica non interagente ed  $j$  è la corrente tra due particelle prime vicine. Per dimostrare il risultato voluto dobbiamo verificare che la soluzione  $u$  esista, ed anche che sia regolare. Per l'esistenza della soluzione si dimostra che esiste un gap spettrale dell'operatore  $L_0$ , che nel caso di equilibrio questo è verificabile con l'ipocoercitività dell'operatore, nel caso di non equilibrio si possono adattare le tecniche di ipocoercitività. Per dimostrazione che l'energia verifica nel limite diffusivo una equazione differenziale stocastica, abbiamo usato un'argomentazione euristica, perché al momento attuale non è chiaro come procedere a livello rigoroso. In conclusione ci sono ancora tante cose da fare ma è stato individuato un percorso che ha buone possibilità di condurre al risultato finale.

# Appendice A

## Teoria della risposta lineare

La Teoria della risposta lineare è uno degli strumenti più usati per descrivere i fenomeni di trasporto. Però rispetto alla risposta ad una perturbazione meccanica, la conduzione di calore è un processo condotto dalle forze al bordo, quindi c'è una difficoltà matematica: non esiste il termine esplicito di piccola perturbazione nella hamiltoniana. Questa difficoltà può essere aggirata al prezzo di pagare per una assunzione ancora più forte: *l'equilibrio locale*. Questa ipotesi è fisicamente ragionevole, ma non è dimostrata rigorosamente anche nei più semplici modelli matematici ed è considerata uno dei punti più deboli della fondazione dell'intera teoria.

Se vale l'equilibrio locale, possiamo definire una temperatura locale  $T(\mathbf{r})$ , permettendoci di introdurre una funzione di distribuzione di non equilibrio:

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\int d\mathbf{r} \beta(\mathbf{r}) h(\mathbf{r})} \quad (\text{A.1})$$

dove  $h(\mathbf{r})$  è la densità hamiltoniana e  $Z$  è la funzione di partizione. Assumendo che le deviazioni dall'equilibrio locale sono piccole, possiamo scrivere  $\beta(\mathbf{r}) = \beta(1 - \Delta T(\mathbf{r})/T)$  e ottenere

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta(H+H')} \quad (\text{A.2})$$

dove  $H'$  è l'hamiltoniana perturbativa

$$H' = -\frac{1}{T} \int d\mathbf{r} \Delta T(\mathbf{r}) h(\mathbf{r}). \quad (\text{A.3})$$



È possibile a questo punto fare un'espansione perturbativa, ottenendo la nota formula di Green-Kubo della conducibilità, che nel caso classico è

$$\bar{k}_{GK} = \frac{1}{k_B T^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t d\tau \lim_{V \rightarrow \infty} V^{-1} \langle \mathbf{J}(\tau) \cdot \mathbf{J}(0) \rangle_V \quad (\text{A.4})$$

dove  $\mathbf{J}$  è il flusso di calore totale.

Nel caso di un cristallo isotropo, la conducibilità termica ha una rappresentazione diagonale ed il tensore si riduce alla quantità scalare:

$$k_{GK} = \frac{1}{k_B d T^2} \lim_{t \rightarrow \infty} \int_0^t d\tau \lim_{V \rightarrow \infty} V^{-1} \langle \mathbf{J}(\tau) \cdot \mathbf{J}(0) \rangle_V. \quad (\text{A.5})$$

La formula di Green-Kubo mette in relazione i coefficienti di trasporto alle fluttuazioni del sistema all'equilibrio. Bisogna, però fare attenzione a varie sottigliezze, per primo vediamo che il limite di volume infinito viene fatto prima del limite di tempi lunghi per evitare il problema della ricorrenza di Poincarè, ovvero che l'evoluzione del sistema lo riporti vicino allo stato iniziale se lo spazio delle fasi è limitato.

La distribuzione che stiamo utilizzando per fare la media è la distribuzione canonica, mentre l'identica espressione ottenuta da Green fa uso della distribuzione microcanonica. In quest'ultimo caso se il momento  $P$  è conservato, deve essere posto uguale a zero, altrimenti  $\langle J \rangle \neq 0$  e l'integrale divergerebbe, altrimenti si calcola la funzione di correlazione connessa  $\langle \mathbf{J}(\tau) \cdot \mathbf{J}(0) \rangle_C = \langle \mathbf{J}(\tau) \cdot \mathbf{J}(0) \rangle - \langle \mathbf{J} \rangle^2$  per ogni  $P \neq 0$ .

# Appendice B

## Ipocoercività: il teorema.

Siano  $\mathcal{H}$  uno spazio di Hilbert,  $L$  un operatore illimitato su  $\mathcal{H}$ , con kernel  $\mathcal{K}$ , che genera un semigruppoo continuo  $(e^{-tL})_{t \geq 0}$ .  $L$  è l'operatore di diffusione associato ad una equazione di diffusione lineare degenera, per verificare che ammetta un gap spettrale, quindi che ci sia convergenza verso lo stato di equilibrio si utilizza la definizione di ipocoercività, la quale si dimostra con il seguente teorema.

**Teorema B.0.1** *Consideriamo un operatore lineare  $L = A^*A + B$ , dove  $B$  è antisimmetrico, e definiamo  $C := [A, B]$ . Assumiamo che esistano delle costanti  $\alpha, \beta$  tali che*

1.  $A$  e  $A^*$  commutano con  $C$ ;  $A$  commuta con  $A$  (ogni  $A_i$  commuta con ogni  $A_j$ );
2.  $[A, A^*]$  è  $\alpha$ -limitato relativamente ad  $I$  ed  $A$ ;
3.  $[B, C]$  è  $\beta$ -limitato ad  $A, A^2, C$  e  $AC$ ;

allora esiste un prodotto scalare  $((\cdot, \cdot))$  su  $\mathcal{H}^1/\mathcal{K}$ , che definisce una norma equivalente alla norma  $\mathcal{H}^1$ , tale che

$$\forall h \in \mathcal{H}/\mathcal{K}, \quad ((h, Lh)) \geq K(\|Ah\|^2 + \|Ch\|^2) \quad (\text{B.1})$$

per  $K > 0$ , dipendente da  $\alpha$  e da  $\beta$ .

Se, inoltre,

$$A^*A + C^*C \quad \text{è } k\text{-coercivo} \quad (\text{B.2})$$

per qualche  $k > 0$ , allora c'è una costante  $\lambda > 0$ , che dipende da  $\alpha, \beta$  e  $k$ , tale che

$$\forall h \in \mathcal{H}^1/\mathcal{K}, \quad ((h, Lh)) \geq \lambda((h, h)). \quad (\text{B.3})$$

In particolare,  $L$  è ipocoercivo in  $\mathcal{H}^1/\mathcal{K}$ :

$$\|e^{-tL}\|_{\mathcal{H}^1/\mathcal{K} \rightarrow \mathcal{H}^1/\mathcal{K}} \leq ce^{-\lambda t}, \quad (c < +\infty) \quad (\text{B.4})$$

dove sia  $\lambda$  che  $c$  possono essere stimati esplicitamente in termini del limite superiore su  $\alpha$  e  $\beta$  e del limite superiore su  $k$ .

**Dimostrazione** La dimostrazione consiste nell'identificare una norma in  $\mathcal{H}^1/\mathcal{K}$ , equivalente alla norma usuale, ma che rende  $L$  un operatore coercivo. E' una tecnica analoga a quella utilizzata per dimostrare un teorema standard dell'algebra lineare: "Se le parti reali degli autovalori di una matrice  $M$ , sono tutti positivi, allora  $e^{-tM} \rightarrow 0$  (esponenzialmente veloce) per  $t \rightarrow \infty$ ."

Definiamo la norma

$$((h, h)) = \|h\|^2 + a\|Ah\|^2 + 2b\Re\langle Ah, Ch \rangle + c\|Ch\|^2, \quad (\text{B.5})$$

dove le costanti positive sono tali che  $1 \gg a \gg b \gg c$ . La norma  $((h, h))$  è equivalente alla norma  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}^1}$ , possiamo dimostrare che  $L$  è coercivo rispetto alla prima ma non rispetto alla seconda. Euristicamente possiamo dire che questa norma, contiene dei termini "puri",  $\|h\|^2$ ,  $\|Ah\|^2$  e  $\|Ch\|^2$ , che risentono l'influenza della parte simmetrica in  $L$ , mentre il termine "misto"  $\langle Ah, Ch \rangle$  risente per la maggior parte l'influenza della parte antisimmetrica.

Per ogni  $h \in \mathcal{K} = \text{Ker}L$  si ha che  $Ah = 0$ ,  $Ch = 0$ , nel qual caso  $((h, h')) = \langle h, h' \rangle_{\mathcal{H}^1} = \langle h, h' \rangle$  per ogni  $h' \in \mathcal{H}$ . In particolare lo spazio ortogonale è lo stesso per i tre prodotti scalari. Quindi ha senso scegliere  $\tilde{\mathcal{H}} = \mathcal{H}/\mathcal{K}$ .

Calcoliamo

$$-\frac{1}{2} \frac{d}{dt} ((e^{-tL}h, e^{-tL}h)) = \Re((e^{-tL}h, Le^{-tL}h)); \quad (\text{B.6})$$

se possiamo limitare inferiormente con una costante che moltiplica  $((e^{-tL}h, Le^{-tL}h))$ , questa derivata temporale, la conclusione deriva semplicemente applicando il Lemma di Gronwall. Per la proprietà di semigruppato, è sufficiente considerare  $t = 0$ , quindi il problema rimane quello di limitare inferiormente  $\Re((h, Lh))$  con un multiplo di  $((h, h))$ .

Abbiamo che

$$\Re((h, Lh)) = \Re\langle h, Lh \rangle + a\langle Ah, ALh \rangle + b(\Re\langle ALh, Ch \rangle + \Re\langle Ah, CLh \rangle) + c\langle Ch, CLh \rangle \quad (\text{B.7})$$

dove  $\Re\langle h, Lh \rangle = \|Ah\|^2$ . Introduciamo la seguente quantità

$$R_2 := [C, B]. \quad (\text{B.8})$$

Per alleviare la notazione assumiamo che  $\mathcal{H}$  sia uno spazio di Hilbert reale, così togliamo le parti reali ovunque. Valutiamo i singoli addendi separatamente, a partire dal secondo:

$$\begin{aligned} \langle Ah, A(B + AA^*)h \rangle &= \langle Ah, ABh \rangle + \langle Ah, AAA^*h \rangle = \\ &= \langle Ah, BAh \rangle + \langle Ah, [A, B]h \rangle + \langle A^2h, A^2h \rangle + \langle Ah, [A, A^*]h \rangle = \\ &= \langle Ah, Ch \rangle + \|A^2h\|^2 + \langle Ah, [A, A^*]Ah \rangle \geq \\ &\geq -\|Ah\|\|Ch\| + \|A^2h\|^2 - \|Ah\|\|[A, A^*]Ah\|; \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

il terzo:

$$\begin{aligned} \langle ALh, Ch \rangle + \langle Ah, CLh \rangle &\geq \\ &\geq \|Ch\|^2 - \|Ah\|\|R_2h\| - 2\|A^2h\|\|CAh\| - \|Ch\|\|[A, A^*]Ah\|; \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

e l'ultimo:

$$\langle Ch, CLh \rangle \geq -\|Ch\|\|R_2h\| + \|CAh\|^2 \quad (\text{B.11})$$

Quindi

$$\begin{aligned} \Re((h, Lh)) &\geq \|Ah\|^2 + a(-\|Ah\|\|Ch\| + \|A^2h\|^2 - \|Ah\|\|[A, A^*]Ah\|) + \\ &\quad + b(\|Ch\|^2 - \|Ah\|\|R_2h\| - 2\|A^2h\|\|CAh\| - \|Ch\|\|[A, A^*]Ah\|) + \\ &\quad + c(-\|Ch\|\|R_2h\| + \|CAh\|^2). \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

Le assunzioni del teorema implicano che

$$\begin{aligned} \|[A, A^*]y\| &\leq \alpha(\|y\| + \|Ay\|), \\ \|R_2h\| &\leq \beta(\|Ah\| + \|A^2h\| + \|Ch\| + \|CAh\|). \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

Sostituiamo queste disuguaglianze in (B.12) ed otteniamo:

$$\begin{aligned} \Re((h, Lh)) &\geq \|Ah\|^2 + a(-\|Ah\|\|Ch\| + \|A^2h\|^2 - \alpha\|Ah\|(\|Ah\| + \|A^2h\|)) + \\ &\quad + b(\|Ch\|^2 - \|Ah\|\beta(\|Ah\| + \|A^2h\| + \|Ch\| + \|CAh\|) + \\ &\quad - 2\|A^2h\|\|CAh\| - \alpha\|Ch\|(\|Ah\| + \|A^2h\|)) + \\ &\quad + c(-\|Ch\|\beta(\|Ah\| + \|A^2h\| + \|Ch\| + \|CAh\|) + \|CAh\|^2). \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

che è più conveniente riscrivere come

$$\Re((h, Lh)) \geq \langle X, mX \rangle_{\mathbf{R}^4}, \quad (\text{B.15})$$

dove  $X$  è un vettore in  $\mathbf{R}^4$  e  $m = [m_{ij}]_{1 \leq i, j \leq 4}$  è una matrice  $4 \times 4$ , diagonale superiore:

$$\begin{aligned} X &:= (\|Ah\|, \|A^2h\|, \|Ch\|, \|CAh\|), \\ m &:= \begin{pmatrix} 1 - (a\alpha + b\beta) & -(a\alpha + b\beta) & -(a + b\alpha + b\beta + c\beta) & -b\beta \\ 0 & a & -(b\alpha + c\beta) & -2b \\ 0 & 0 & b - c\beta & -c\beta \\ 0 & 0 & 0 & c \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Se la parte simmetrica di  $m$  è definita positiva, allora vale la disuguaglianza (B.1). Per la parte restante del teorema, la  $k$ -coercività di  $A^*A + C^*C$ , implica che

$$\|Ah\|^2 + \|Ch\|^2 \geq \frac{1}{2}(\|Ah\|^2 + \|Ch\|^2) + \frac{k}{2}\|h\|^2 \geq \frac{\min(1, k)}{2}\|h\|_{\mathcal{H}^1}^2. \quad (\text{B.17})$$

Adesso dobbiamo scegliere  $a, b$  e  $c$  in modo tale che la parte simmetrica di  $m$ , sia definita positiva:

$$\begin{cases} \forall i & m_{ii} > 0; \\ \forall (i, j), i \neq j & \Rightarrow m_{i,j} \ll \sqrt{m_{ii}m_{jj}}. \end{cases} \quad (\text{B.18})$$

Sia  $M := \max(1, \alpha, \beta)$ , assumiamo che

$$1 \geq a \geq b \geq 2c, \quad (\text{B.19})$$

allora possiamo limitare  $m$  da sotto con

$$\begin{pmatrix} 1 - 2aM & -2aM & -4aM & -bM \\ 0 & a & -2bM & -2bM \\ 0 & 0 & b - cM & -cM \\ 0 & 0 & 0 & c \end{pmatrix}. \quad (\text{B.20})$$

Assumiamo inoltre che

$$a \leq \frac{1}{4M}, \quad c \leq \frac{b}{2M}, \quad (\text{B.21})$$

dunque possiamo ulteriormente limitare  $m$  da sotto con

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -2aM & -4aM & -bM \\ 0 & a & -2bM & -2bM \\ 0 & 0 & \frac{b}{2} & -cM \\ 0 & 0 & 0 & c \end{pmatrix} \equiv (\tilde{m}_{ij}). \quad (\text{B.22})$$

Imponendo

$$|\tilde{m}_{ij}| \leq \sqrt{\tilde{m}_{ii}\tilde{m}_{jj}}/2 \leq (\tilde{m}_{ii} + \tilde{m}_{jj})/4 \quad (\text{B.23})$$

Segue che

$$\sum_{ij} \tilde{m}_{ij} X_i X_j \geq \sum_i \tilde{m}_{ii} X_i^2 - \frac{3}{4} \sum_i \tilde{m}_{ii} X_i^2 = \frac{1}{4} \sum \tilde{m}_{ii} X_i^2 \quad (\text{B.24})$$

Il termine 3 in 3/4 c'è perché ogni termine diagonale partecipa nel controllo dei tre termini fuori diagonale.

Per assicurare la condizione (B.23), è sufficiente prendere

$$\begin{aligned} 2Ma &\leq \sqrt{\frac{a}{8}}, & 4Ma &\leq \sqrt{\frac{b}{16}}, & Mb &\leq \sqrt{\frac{c}{8}}, & 2Mb &\leq \sqrt{\frac{ab}{8}}, \\ 2Mb &\leq \sqrt{\frac{ac}{4}}, & Mc &\leq \sqrt{\frac{bc}{8}}, \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

che vengono soddisfatte da

$$a, \frac{b}{a}, \frac{c}{b} \leq \frac{1}{32M^2} \quad \frac{a^2}{b}, \frac{b^2}{zc} \leq \frac{1}{256M^2}. \quad (\text{B.26})$$

# Indice

<b>1</b>	<b>La Legge di Fourier</b>	<b>4</b>
1.1	La Legge Macroscopica . . . . .	5
1.2	Lo stato attuale della nostra conoscenza (o della nostra ignoranza). . . . .	5
1.3	Conduzione di calore nei gas . . . . .	8
1.4	Conduzione di calore nei cristalli. . . . .	10
1.5	Bagni termici . . . . .	11
1.5.1	Reservoir stocastico . . . . .	11
1.5.2	Termostati . . . . .	12
1.5.3	<i>Reservoir</i> hamiltoniani/stocastici . . . . .	12
1.6	Lo Stato Stazionario . . . . .	13
1.7	Alcuni risultati esatti . . . . .	15
1.7.1	Fluidi . . . . .	15
1.7.2	Cristallo Armonico . . . . .	15
1.7.3	Cristallo Anarmonico . . . . .	16
1.7.4	Dinamiche ibride stocastiche . . . . .	16
1.7.5	Sistemi stocastici . . . . .	17
<b>2</b>	<b>Il caso armonico con singolo reservoir</b>	<b>20</b>
2.1	Introduzione . . . . .	20
2.2	Il modello . . . . .	21
2.3	Il risultato . . . . .	24
2.4	La dimostrazione del teorema . . . . .	26
2.4.1	<i>Tightness</i> . . . . .	26
2.4.2	Caratterizzazione del limite . . . . .	29
2.4.3	Unicità del limite . . . . .	35
2.4.4	Comportamento asintotico dell'equazione limite . . . . .	37

---

<b>3</b>	<b>Il cristallo anarmonico debolmente interagente connesso a due <i>reservoirs</i></b>	<b>40</b>
3.1	Introduzione . . . . .	40
3.2	Il modello . . . . .	41
3.2.1	L'evoluzione mesoscopica . . . . .	43
3.2.2	<i>Tightness</i> . . . . .	44
3.2.3	Identificazione del limite . . . . .	47
3.2.4	Ipocoercitività . . . . .	49
3.3	Caso armonico di due <i>reservoir</i> . . . . .	50
3.3.1	La legge di Fourier . . . . .	52
<b>A</b>	<b>Teoria della risposta lineare</b>	<b>55</b>
<b>B</b>	<b>Ipocoercitività: il teorema.</b>	<b>57</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>63</b>



# Bibliografia

- [1] Giada Basile, Cédric Bernardin, and Stefano Olla. Communications in mathematical physics; thermal conductivity for a momentum conservative model.
- [2] Giada Basile, Cedric Bernardin, and Stefano Olla. Physical review letters; momentum conserving model with anomalous thermal conductivity in low dimensional systems. 96(20), 2006.
- [3] Cedric Bernardin and Stefano Olla. Journal of statistical physics; fouriers law for a microscopic model of heat conduction. 121(3-4):271–289, 2005.
- [4] L Bertini, A De Sole, D Gabrielli, G Jona-Lasinio, and C Landim. Stochastic interacting particle systems out of equilibrium. 2007.
- [5] Patrick Billingsley. *Convergence of probability measures*. Wiley Series in Probability and Statistics: Probability and Statistics. John Wiley & Sons Inc., New York, second edition, 1999. A Wiley-Interscience Publication.
- [6] F Bonetto, J Lebowitz, J Lukkarinen, and S Olla. Journal of statistical physics; heat conduction and entropy production in anharmonic crystals with self-consistent stochastic reservoirs.
- [7] F. Bonetto, J. L. Lebowitz, and L. Rey-Bellet. Fourier’s law: a challenge for theorists. Feb 2000.
- [8] M. Rich Bosterli and W.M. Visscher. page p. 1086., 1970.
- [9] S.G. Brush. *The Kind of Motion We Call Heat*. North-Holland, 1986.

- 
- [10] Stefano Olla Cedric Bernardin. Fourier's law for a microscopic model of heat conduction. *Journal of Statistical Physics*, 121(3-4):271–289, 2005.
- [11] S. Cerrai and P. Clément. Well-posedness of the martingale problem for some degenerate diffusion processes occurring in dynamics of populations\* 1. *Bulletin des Sciences Mathématiques*, 128(5):355–389, 2004.
- [12] J.-P. Eckmann and M. Hairer. 1999.
- [13] J.-P. Eckmann and M. Hairer. Non-equilibrium statistical mechanics of strongly anharmonic chains of oscillators. *Commun. Math. Phys.*, 212:105–164, 2000.
- [14] J.-P. Eckmann, C.-A. Pillet, and L. Rey-Bellet. Non-equilibrium statistical mechanics of anharmonic chains coupled to two heat baths at different temperatures. *Communications in Mathematical Physics*, 201:657–697, 1999. 10.1007/s002200050572.
- [15] W. Engelbert, H. J. AU Schmidt. *Strong Markov Continuous Local Martingales and Solutions of One-Dimensional Stochastic Differential Equations (Part III)*. WILEY-VCH Verlag, 1991.
- [16] G Gallavotti and EGD Cohen. Journal of statistical physics; dynamical ensembles in stationary states. 80(5-6):931–970, 1995.
- [17] Iosif Gihman and Anatoliĭ Skorohod. *The Theory of Stochastic Processes*. Springer-Verlag, 1974.
- [18] M. Hairer and G. Pavliotis. From ballistic to diffusive behavior in periodic potentials. *Journal of Statistical Physics*, 131:175–202, 2008. 10.1007/s10955-008-9493-3.
- [19] W.G. Hoover. *Computational Statistical Mechanics*. Elsevier Science Publisher, 1991.
- [20] Lars Hormander. *The Analysis of Linear Partial Differential Operators III*. Springer, 1985.
- [21] C.-A. Pillet J.-P. Eckmann and L. Rey-Bellet. *Commun. Math. Phys.*, 201(657), 1999.

- 
- [22] C.-A. Pillet J.-P. Eckmann and L. Rey-Bellet. *Journal of Statistical Physics*, 92(305), 1999.
- [23] Ioannis Karatzas and Steven E. Shreve. *Brownian Motion and Stochastic Calculus (Graduate Texts in Mathematics)*. Springer, 1991.
- [24] S Lepri, R Livi, and A Politi. Phys. rep.; thermal conduction in classical low-dimensional lattices. 377, 2003.
- [25] C. Liverani and S. Olla. Toward the Fourier law for a weakly interacting anharmonic crystal. *Arxiv preprint arXiv:1006.2900*, June 2010.
- [26] Mathias Michel, Jochen Gemmer, and Günter Mahler. Microscopic quantum mechanical foundation of fourier’s law.
- [27] Peierls. *Quantum Theory of Solids*. Oxford Univ. Press, 1953.
- [28] Z. Rieder, J. L. Lebowitz, and E. Lieb. Properties of a harmonic crystal in a stationary nonequilibrium state. *Journal of Mathematical Physics*, 8(5):1073–1078, 1967.
- [29] M Rockner and FY Wang. Journal of functional analysis; weak poincare inequalities and l2-convergence rates of markov semigroups. pages 564–603, 2001.
- [30] C. Kipnis S. Goldstein and N. Ianiro. *Journal of Statistical Physics*, 34(263), 1995.
- [31] J.L. Lebowitz S. Goldstein and E. Presutti. *Colloquia Mathematica Societati Janos Bolay*, 27(421), 1979.
- [32] Herbert Spohn. *Large Scale Dynamics of Interacting Particles*. Springer, 1991.
- [33] Herbert Spohn and Joel Lebowitz. Communications in mathematical physics; stationary non-equilibrium states of infinite harmonic systems. 54(2):97–120, 1977.
- [34] Daniel W. Stroock and S. R. Srinivasa Varadhan. *Multidimensional diffusion processes*. Classics in Mathematics. Springer-Verlag, Berlin, 2006. Reprint of the 1997 edition.

- [35] S. R. S. Varadhan. *Stochastic processes*. Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, New York, 1968. Based on a course given at the Courant Institute of Mathematical Sciences during 1967-68, Bibliography: p. 189-190.
- [36] S. R. S. Varadhan. *Probability theory*, volume 7 of *Courant Lecture Notes in Mathematics*. Courant Institute of Mathematical Sciences, New York University, New York, 2001.
- [37] C Villani. *Hypocoercivity*. 2006.