

UNIVERSITÉ DE NICE - SOPHIA ANTIPOLIS  
LABORATOIRE J.-A. DIEUDONNÉ  
ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES FONDAMENTALES ET APPLIQUÉES  
SPÉCIALITÉ MATHÉMATIQUES

# Quelques résultats en Analyse Semiclassique

HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

*présentée et soutenue à l'Université de Nice par*

*Laurent MICHEL*

*le 19 Novembre 2010 devant le jury composé de*

Bernard Helffer	Université Paris-Sud 11
Gilles Lebeau	Université de Nice
Francis Nier	Université de Rennes 1
Vesselin Petkov	Université Bordeaux 1
Fabrice Planchon	Université de Nice
Johannes Sjöstrand	CNRS et Université de Bourgogne

*après avis des rapporteurs*

Bernard Helffer	Université Paris-Sud 11
Johannes Sjöstrand	CNRS et Université de Bourgogne
Maciej Zworski	University of California Berkeley



UNIVERSITÉ DE NICE - SOPHIA ANTIPOLIS  
LABORATOIRE J.-A. DIEUDONNÉ  
ÉCOLE DOCTORALE SCIENCES FONDAMENTALES ET APPLIQUÉES  
SPÉCIALITÉ MATHÉMATIQUES

# Quelques résultats en Analyse Semiclassique

HABILITATION À DIRIGER DES RECHERCHES

*présentée et soutenue à l'Université de Nice par*

*Laurent MICHEL*

*le 19 Novembre 2010 devant le jury composé de*

Bernard Helffer	Université Paris-Sud 11
Gilles Lebeau	Université de Nice
Francis Nier	Université de Rennes 1
Vesselin Petkov	Université Bordeaux 1
Fabrice Planchon	Université de Nice
Johannes Sjöstrand	CNRS et Université de Bourgogne

*après avis des rapporteurs*

Bernard Helffer	Université Paris-Sud 11
Johannes Sjöstrand	CNRS et Université de Bourgogne
Maciej Zworski	University of California Berkeley



## Remerciements

Mes premiers remerciements vont à Bernard Helffer, Johannes Sjöstrand et Maciej Zworski qui m'ont fait l'honneur d'être rapporteurs de ce mémoire. Par leurs remarques ils m'ont permis d'améliorer sensiblement sa rédaction. Gilles Lebeau, Francis Nier, Vesselin Petkov et Fabrice Planchon ont accepté de participer au jury de ma soutenance, je les en remercie.

Je tiens aussi à remercier mes collaborateurs : Jean-François Bony qui m'a beaucoup appris sur la théorie des résonances, Colin Guillarmou et Hans Christianson pour leur vision très géométrique, Persi Diaconis qui m'a initié à l'analyse de l'opérateur de Metropolis et bien sur Gilles Lebeau avec qui j'ai pris beaucoup de plaisir à travailler.

Je n'oublie pas mes collègues du Laboratoire Jean-Alexandre Dieudonné dont la compagnie rend ce lieu si agréable et propice au travail.

J'ai pu bénéficier à plusieurs reprises de délégations CNRS, je remercie la direction du Laboratoire et le CNRS de m'avoir soutenu.

Mes derniers remerciements vont à ma famille : mes parents et ma compagne qui m'ont toujours soutenu, mes enfants qui ont si bien su me changer les idées.



# Table des matières

<b>I</b>	<b>Introduction</b>	<b>7</b>
<b>II</b>	<b>Sur l'équation de Schrödinger</b>	<b>13</b>
<b>1</b>	<b>Autour de l'amplitude de diffusion en régime semiclassique</b>	<b>15</b>
1.1	Introduction . . . . .	15
1.2	Estimations microlocales des états résonnants et applications . . . . .	18
1.2.1	Estimations microlocales des états résonnants . . . . .	19
1.2.2	Application à l'étude des résidus de l'amplitude de diffusion . . . . .	24
1.2.3	Estimation des projecteurs spectraux . . . . .	25
1.3	Equation de Schrödinger avec champ magnétique . . . . .	27
1.3.1	Principe d'absorption limite et représentation de la matrice de diffusion . . . . .	29
1.3.2	Asymptotiques lorsque le champ magnétique domine le potentiel électrique . . . . .	31
1.3.3	Asymptotiques lorsque le champ magnétique et le potentiel électrique sont de même ordre de grandeur . . . . .	35
<b>2</b>	<b>Sur l'équation de Schrödinger non-linéaire avec champ magnétique</b>	<b>47</b>
2.1	Sur le problème de Cauchy . . . . .	49
2.2	Esquisse de démonstration . . . . .	50
2.2.1	Quelques Lemmes préliminaires . . . . .	50
2.2.2	Preuve du Théorème 2.1.1 . . . . .	50
2.2.3	Preuve du Théorème 2.1.3 . . . . .	55
2.3	Approximation WKB dans la limite $b \rightarrow \infty$ . . . . .	56
<b>III</b>	<b>Sur les opérateurs de marche aléatoire</b>	<b>59</b>
<b>3</b>	<b>Généralités sur les noyaux de Markov et l'algorithme de Metropolis</b>	<b>63</b>
3.1	Chaînes de Markov sur un espace fini . . . . .	63
3.2	Algorithme de Metropolis sur un ensemble fini . . . . .	64
3.3	Généralités sur les noyaux de Markov . . . . .	65
3.4	Opérateurs de marche aléatoire et de Metropolis dans le cas continu . . . . .	66
<b>4</b>	<b>Cas d'un espace d'état borné</b>	<b>73</b>
4.1	Marche aléatoire sur une variété compacte sans bord . . . . .	73
4.1.1	Étude de l'opérateur de marche aléatoire . . . . .	74
4.1.2	Étude de l'opérateur de Metropolis . . . . .	75
4.1.3	Esquisses de preuves . . . . .	76

4.1.4	Convergence vers le mouvement brownien . . . . .	81
4.2	Algorithme de Metropolis sur un ouvert borné . . . . .	85
4.2.1	Trou spectral pour une densité peu régulière . . . . .	85
4.2.2	Estimations de variation totale . . . . .	90
4.2.3	Étude précisée du spectre dans le cas régulier . . . . .	92
4.2.4	Le problème historique . . . . .	96
<b>5</b>	<b>Opérateurs de marche aléatoire sur un domaine non borné</b>	<b>101</b>
5.1	Cas d'un espace plat . . . . .	101
5.1.1	Énoncé des résultats . . . . .	101
5.1.2	Esquisses de preuves . . . . .	104
5.2	Cas d'une variété présentant des pointes hyperboliques . . . . .	109
5.2.1	Étude de l'opérateur dans une pointe hyperbolique . . . . .	111
5.2.2	Étude du spectre essentiel . . . . .	113
5.2.3	Preuve du trou spectral . . . . .	114



**Première partie**

**Introduction**



On résume dans ce mémoire la quasi-totalité des travaux que j'ai réalisés depuis ma thèse. Ceux-ci peuvent être classés dans deux grandes thématiques : l'étude de l'équation de Schrödinger en régime semiclassique et l'étude d'opérateurs de marche aléatoire semiclassiques. L'analyse semiclassique sera donc le fil conducteur de ce mémoire.

L'objet de ma thèse était l'étude de l'amplitude de diffusion pour l'équation de Schrödinger semiclassique sous des hypothèses de non capture affaiblies. Les résultats que j'avais obtenus reposaient en grande partie sur des estimations de la résolvante et l'étude des résonances. Le dernier chapitre de ma thèse visait à obtenir des estimations a priori du résidu de l'amplitude de diffusion associé à une résonance vérifiant des hypothèses convenables. Afin d'étudier plus finement ce résidu, je me suis consacré ensuite à l'étude microlocale des états résonnants pour l'équation de Schrödinger. Le résultat principal obtenu en collaboration avec J.-F. Bony [BM04] affirme que les états résonnants sont sortants.

Dans la continuation des travaux de ma thèse je me suis aussi intéressé à la théorie de la diffusion pour l'équation de Schrödinger avec champ magnétique constant. Sous certaines hypothèses sur le potentiel électrique, on peut définir l'amplitude de diffusion et donner une formule de représentation explicite utilisant la résolvante [Mic05a]. Lorsque les intensités respectives du champ magnétique et du potentiel électrique, deviennent grandes, on peut donner un développement asymptotique de l'amplitude de diffusion. Dans le cas où le champ magnétique domine, l'analyse n'est pas très compliquée et s'apparente à une analyse "haute énergie" pour l'équation de Schrödinger. Dans le cas où les intensités sont de même ordre, on aboutit à un régime semiclassique que nous avons étudié dans [Mic05c].

Dans le dernier chapitre de la première partie, on résume des résultats obtenus sur l'équation de Schrödinger non-linéaire, en présence d'un champ magnétique dépendant du temps et à croissance au plus linéaire dans la variable d'espace, [Mic08]. Le résultat principal porte sur le problème de Cauchy, dont on montre qu'il est localement bien posé dans l'espace d'énergie naturellement associé à l'équation. Bien qu'il ne s'agisse pas d'analyse semiclassique, nous avons inclus ce résultat dans ce mémoire.

La seconde grande thématique présentée dans ce mémoire est l'analyse d'opérateurs markoviens dans un contexte semiclassique. L'exemple type de tels opérateurs est le suivant. Etant donnée une variété Riemannienne  $M$ , l'opérateur  $T_h$  agit sur les fonctions continues en calculant leur moyenne sur la boule géodésique centrée en un point  $x$  et de rayon  $h$ . De tels opérateurs possèdent naturellement une mesure invariante  $dv_h$  (c'est à dire un point fixe pour l'opérateur transposé) et le noyau  $t_h^n(x, dy)$  de l'opérateur itéré  $n$  fois  $T_h^n$  converge vers  $dv_h$  lorsque  $n$  tend vers l'infini.

Cette propriété justifie l'utilisation de nombreux algorithmes markoviens dans des procédés d'échantillonnage et une question probabiliste importante consiste à quantifier la vitesse de convergence des itérés de  $t_h$  vers sa mesure stationnaire. Un tel problème a été traité avec succès par Diaconis et Lebeau dans un article pionnier [DL09].

Dans une série de travaux avec P. Diaconis et G. Lebeau, puis H. Christianson et C. Guillarmou, nous avons montré comment les techniques d'analyse semiclassique s'appliquent à différents contextes. Nous avons d'abord étudié les opérateurs précédents sur un espace d'état borné : une variété compacte dans [LM10] et un ouvert borné de l'espace Euclidien dans [DLM08]. Dans un second temps nous nous sommes consacré à des espaces d'état non compacts : l'espace euclidien muni d'une densité de probabilité [GM10] et une variété présentant des pointes hyperboliques [CGM10].

Dans tous les cas abordés, on exhibe un opérateur limite (lorsque  $h$  tend vers 0) pour l'opérateur  $T_h$  que l'on utilise pour obtenir des informations sur la théorie spectrale de  $T_h$ . A l'aide de ces informations, on étudie la convergence vers la mesure stationnaire.

On termine cette introduction en précisant quelques notations d'analyse semiclassique qui seront utilisées par la suite. Nous avons adopté les notations de [DS99] que nous rappelons très brièvement ici pour le confort du lecteur. On appelle fonction d'ordre sur  $\mathbb{R}^n$ , une fonction  $m : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$  telle qu'il existe des constantes  $C_0, N_0 > 0$  telles que  $m(x) \leq C_0 \langle x - y \rangle^{N_0} m(y)$ .

Etant donnée une fonction d'ordre  $m$ , on note  $S(m) = S(\mathbb{R}^n, m)$  l'ensemble des fonctions  $a \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$  telles que pour tout  $\alpha \in \mathbb{N}^n$ , il existe  $C_\alpha > 0$  tel que  $|\partial_x^\alpha a| \leq C_\alpha m(x)$ . Si  $a(x, h)$  dépend d'un paramètre  $h$ , on dira que  $a \in S(\mathbb{R}^n, m, h)$  si  $a(\cdot, h)$  est uniformément borné dans  $S(m)$  lorsque  $h$  varie. Lorsque le paramètre  $h$  est évident, on note simplement  $S(m)$ . Pour  $k \in \mathbb{R}$ , on note  $S^k(m, h) = h^{-k} S(m, h)$  et pour  $\delta \in [0, 1]$ , on note  $S_\delta^k(m, h)$  l'espace des fonctions  $a$  régulières telles que  $|\partial_x^\alpha a(x, h)| \leq C_\alpha m(x) h^{-k - \delta|\alpha|}$  pour tout  $\alpha \in \mathbb{N}^n$ . On notera aussi  $S^{-\infty}(m, h) = \bigcap_{k \in \mathbb{R}} S^k(m, h)$ . Lorsque la fonction d'ordre est égale à 1, note  $S(1) = S$ ,  $S^k(1) = S^k$ , etc.

On notera  $S_{cl}(m)$  les symboles ayant un développement en puissances de  $h$  dont les coefficients appartiennent à  $S(m)$  et sont indépendants de  $h$ .

Pour  $a \in S_\delta^k(\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d, m)$ ,  $\delta \in [0, \frac{1}{2}]$ , on définit  $\text{Op}_h(a)$  et  $\text{Op}_h^w(a)$  par

$$\text{Op}_h(a)(u)(x) = a(x, hD_x)u(x) = \frac{1}{(2\pi h)^n} \int \int e^{i(x-y)\xi/h} a(x, \xi) u(y) dy d\xi \quad (0.0.1)$$

et

$$\text{Op}_h^w(a)(u)(x) = a^w(x, hD_x)u(x) = \frac{1}{(2\pi h)^n} \int \int e^{i(x-y)\xi/h} a\left(\frac{x+y}{2}, \xi\right) u(y) dy d\xi \quad (0.0.2)$$

On notera  $\mathcal{E}_\delta^k = \text{Op}_h(S_\delta^k(1))$  et  $\mathcal{E}_{cl} = \text{Op}_h(S_{cl}(1))$ . Si  $\delta = 0$ , ou  $k = 0$  on abandonnera l'indice correspondant dans la notation précédente. Dans le chapitre 4, on notera  $\mathcal{E}_{cl}(\langle \xi \rangle^{-\infty})$  les opérateurs dont le symbole possède un développement en puissance de  $h$  avec des coefficients appartenant à  $S(\langle \xi \rangle^{-N})$  pour tout  $N \in \mathbb{N}$ . On renvoie à [DS99] pour les principaux résultats d'analyse microlocale que nous utiliserons.

Etant données deux fonctions  $f$  et  $g$ , on note  $f \prec g$  dès que  $g$  est égale à 1 sur le support de  $f$ .

## Liste des publications présentées

Ce mémoire résume les travaux suivants :

- Spectral analysis of random walk operators on euclidian space (avec C. Guillarmou), <http://arxiv.org/abs/1006.3065>
- Random walk on surfaces with hyperbolic cusps (avec H. Christianson et C. Guillarmou), <http://arxiv.org/abs/1005.2754>
- Geometric analysis for the Metropolis algorithm on Lipschitz domains (avec P. Diaconnis et G. Lebeau), preprint de l'université de Nice, <http://math.unice.fr/~lmichel/publi/Metro-Lipschitz.pdf>.
- Semiclassical analysis of a random walk on a manifold (avec G. Lebeau), *Annals of Probability*, 38 (2010), pp 277-315.
- Remarks on non-linear Schrödinger equation with magnetic fields, *Comm. Partial. Diff. Eq.*, Vol 33, Issue 7, July 2008, pp 1198 - 1215.
- Scattering amplitude for the Schrödinger equation with strong magnetic field and strong electric potential, *Int. Math. Res. Not.*, 49 (2005) 3005-3053.
- Scattering amplitude and scattering phase in strong magnetic field, *J. Math. Phys.*, 46 (2005), 043514, 18 pages.
- Microlocalization of resonant states and estimates of the residue of the scattering amplitude (avec J. F. Bony), *Comm. Math. Phys.*, 246 (2004), 375-402.



Deuxième partie

Sur l'équation de Schrödinger





# Chapitre 1

## Autour de l'amplitude de diffusion en régime semiclassique

### 1.1 Introduction

Dans cette partie on introduit très brièvement l'amplitude de diffusion pour l'équation de Schrödinger et on rappelle un résultat démontré à la fin de ma thèse (voir aussi l'article [Mic03]) de manière à introduire la suite de mes travaux. Considérons l'opérateur de Schrödinger semiclassique  $P(h) = -h^2\Delta + V(x)$ ,  $x \in \mathbb{R}^n$  et  $h \in ]0, 1]$ . On supposera que  $V$  est de classe  $C^\infty$  et satisfait des hypothèses de décroissance de courte portée suivante :

**Hypothèse 1** *Il existe  $\rho > 1$  tel que*

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^n, \forall x \in \mathbb{R}^n, |\partial^\alpha V(x)| \leq C_\alpha \langle x \rangle^{-\rho} \quad (1.1.1)$$

Notons  $P_0(h) = -h^2\Delta$ . L'opérateur  $P(h)$  est un opérateur pseudo-différentiel de symbole semiclassique  $p(x, \xi) = |\xi|^2 + V(x)$ . On notera  $H_p = 2\xi\partial_x - \nabla V(x)\partial_\xi$  le champ hamiltonien associé et  $\exp(tH_p)(x, \xi)$  le flot Hamiltonien au temps  $t$  issu de  $(x, \xi)$  au temps 0.

Sous les hypothèses précédentes, la théorie de la diffusion pour la paire  $(P_0(h), P(h))$  est bien connue. Les opérateurs d'onde  $W_\pm$  existent et sont complets et l'on peut donc définir l'opérateur de diffusion  $S(h) : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$ . L'opérateur de diffusion est un opérateur très important puisqu'il permet de relier les dynamiques en temps long des équations de Schrödinger libre et perturbée (par le potentiel  $V$ ). C'est un opérateur unitaire qui se diagonalise via la transformation de Fourier. Plus précisément, notons  $\mathcal{F}_h : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$  la transformation de Fourier semiclassique :

$$\mathcal{F}_h f(\xi) = (2\pi h)^{-n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ih^{-1}\langle x, \xi \rangle} f(x) dx \quad (1.1.2)$$

et pour  $\lambda > 0$ , soit  $\mathcal{F}_h(\lambda) : L^2(\mathbb{R}^n, \langle x \rangle^\alpha dx) \rightarrow L^2(\mathbb{S}^{n-1})$ ,  $\alpha > \frac{1}{2}$  définie par

$$\mathcal{F}_h(\lambda) f(\omega) = \frac{1}{(2\pi h)^{\frac{n}{2}} \sqrt{2}} \lambda^{\frac{n-2}{4}} \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ih^{-1}\sqrt{\lambda}\langle x, \omega \rangle} f(x) dx. \quad (1.1.3)$$

pour tout  $\omega \in \mathbb{S}^{n-1}$ . L'identité de Parseval montre que l'opérateur  $\tilde{\mathcal{F}}_h : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^+, L^2(\mathbb{S}^{n-1}))$  défini par

$$(\tilde{\mathcal{F}}_h f)(\lambda) = (2\pi h)^{\frac{n}{2}} \mathcal{F}_h(\lambda) f \quad (1.1.4)$$

est une isométrie. De plus, on voit facilement que

- $\tilde{\mathcal{F}}_h P_0(h) \tilde{\mathcal{F}}_h^*$  est la multiplication par  $\lambda$  sur  $L^2(\mathbb{R}^+, L^2(\mathbb{S}^{n-1}))$
- pour tout  $t > 0$ ,  $\tilde{\mathcal{F}}_h S(h) \tilde{\mathcal{F}}_h^*$  et  $e^{it\tilde{\mathcal{F}}_h P_0(h) \tilde{\mathcal{F}}_h^*}$  commutent.

On déduit alors du Théorème XIII.84 de [RS78] qu'il existe une fonction  $\lambda \mapsto S(\lambda, h)$  appartenant à  $L^\infty(\mathbb{R}_+^*, \mathcal{L}(L^2(\mathbb{S}^{n-1})))$  telle que

$$(\tilde{\mathcal{F}}_h S(h) \varphi)(\lambda) = S(\lambda, h) (\tilde{\mathcal{F}}_h \varphi)(\lambda), \quad \forall \varphi \in L^2(\mathbb{R}^n) \quad (1.1.5)$$

Sous l'hypothèse de courte portée du potentiel  $V$ , l'opérateur  $T(\lambda, h) = Id - S(\lambda, h)$  possède un noyau  $(\omega, \omega') \in \mathbb{S}^{n-1} \times \mathbb{S}^{n-1} \mapsto T(\omega, \omega', \lambda, h)$  qui est régulier. Ce noyau s'appelle amplitude de diffusion. Il contient toute l'information sur la théorie de la diffusion. Une question importante consiste à décrire ce noyau lorsque le paramètre semiclassique tend vers 0. Cette étude (en particulier le lien avec la dynamique classique sous-jacente) a été menée par Robert et Tamura [RT89] dans le cas où le flot Hamiltonien classique est non captif sur la surface d'énergie  $p(x, \xi) = \lambda$ . L'objet de ma thèse consistait à étendre ces résultats à des cas où il peut exister des trajectoires captées.

Rappelons maintenant le résultat de Robert et Tamura. On introduit quelques quantités liées au flot Hamiltonien classique. Pour  $\omega \in \mathbb{S}^{n-1}$ , on note  $\Upsilon_\omega$  l'hyperplan de  $\mathbb{R}^n$  orthogonal à  $\omega$ . On note  $z = (z_1, \dots, z_{n-1})$  un système de coordonnées de  $\Upsilon_\omega$  et  $\hat{z} = z + 0\omega \in \mathbb{R}^n$ . Pour tout  $z \in \Upsilon_\omega$  et pour tout  $\lambda > 0$ , il existe une unique courbe intégrale  $t \mapsto (q_\infty, p_\infty)(t, z, \lambda, \omega)$  de  $H_p$  telle que

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \|(q_\infty, p_\infty)(t, z, \lambda, \omega) - (\sqrt{\lambda}\omega t + \hat{z}, \sqrt{\lambda}\omega)\|_{\mathbb{R}^n} = 0 \quad (1.1.6)$$

Comme le niveau d'énergie  $\lambda$  est supposé non captif, cette particule s'échappe de tout compact lorsque  $t$  tend vers l'infini et il existe  $\xi_\infty(z, \lambda) \in \mathbb{S}^{n-1}$  et  $r_\infty(z, \lambda) \in \mathbb{R}^n$  tels que

$$\begin{cases} \lim_{t \rightarrow +\infty} |p_\infty(t, z, \lambda, \omega) - \sqrt{\lambda}\xi_\infty(z, \lambda)| = 0, \\ \lim_{t \rightarrow +\infty} |q_\infty(t, z, \lambda, \omega) - \sqrt{\lambda}\xi_\infty(z, \lambda)t - r_\infty(z, \lambda)| = 0. \end{cases} \quad (1.1.7)$$

De plus, il est facile de montrer que l'application  $\Upsilon_\omega \ni z \rightarrow \xi_\infty(z, \lambda) \in \mathbb{S}^{n-1}$  est régulière ( cf. [RS78] ), de sorte que nous pouvons définir

$$\hat{\sigma}(z, \lambda) = |\det(\xi_\infty, \partial_{z_1}\xi_\infty, \dots, \partial_{z_{n-1}}\xi_\infty)|. \quad (1.1.8)$$

**Définition 1.1.1** *Nous dirons que  $\theta \in \mathbb{S}^{n-1}$  est régulière pour  $(\lambda, \omega)$ , si  $\theta \neq \omega$  et  $\forall z \in \Upsilon_\omega$ ,  $\xi_\infty(z, \lambda) = \theta \implies \hat{\sigma}(z, \lambda) \neq 0$ .*

On remarque que si  $\theta \in \mathbb{S}^{n-1}$  est régulier pour  $(\lambda, \omega)$ , on déduit du théorème des fonctions implicites qu'il existe un ensemble fini  $\{z^1, \dots, z^l\}$  de points appartenant à  $\Upsilon_\omega$  tels que  $\xi_\infty(z, \lambda) = \theta \implies z \in \{z^1, \dots, z^l\}$ .

**Théorème 1.1.2 ( Robert-Tamura 1989 )** *Supposons que le niveau d'énergie  $\lambda$  est non captif et que la direction  $\omega' \in \mathbb{S}^{n-1}$  est régulière pour  $(\lambda, \omega)$ . Alors*

$$f(\omega, \omega', \lambda, h) = \sum_{j=1}^l \hat{\sigma}(z^j(\lambda), \lambda)^{-\frac{1}{2}} e^{ih^{-1}S_j(\lambda) - i\mu_j \frac{\pi}{2}} d\lambda + O(h) \quad (1.1.9)$$

où

$$S_j(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{1}{2} |p_\infty(t, z^j, \lambda, \omega)|^2 - V(q_\infty(t, z^j, \lambda, \omega)) - \lambda \right) dt - \langle r_\infty(z^j, \lambda, \sqrt{2\lambda}\theta) \rangle \quad (1.1.10)$$

et  $\mu_j \in \mathbb{Z}$  est l'indice de Maslov de la trajectoire  $(q_\infty(t, z^j, \lambda, \omega), p_\infty(t, z^j, \lambda, \omega))$  sur la variété Lagrangienne

$$\{(x, \xi) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n : x = q_\infty(t, z, \lambda, \omega), \xi = p_\infty(t, z, \lambda, \omega), z \in \Lambda_\omega, t \in \mathbb{R}\}.$$

Ce théorème établit un lien entre l'opérateur de diffusion quantique et l'opérateur de diffusion classique lorsque  $h \rightarrow 0$ . L'objet de ma thèse était d'étendre ce résultat au cas où certaines directions  $\omega$  seulement sont non-captives sur la surface d'énergie  $\lambda$ . L'une des difficultés à surmonter était d'obtenir des estimations polynomiales de la résolvante pour des géométries captives. Pour cela, j'ai utilisé des informations venant de la théorie des résonances.

L'influence des résonances sur l'amplitude de diffusion peut aussi être examiné de manière plus directe en étudiant le prolongement méromorphe de l'amplitude de diffusion.

**Hypothèse 2** *Supposons qu'il existe  $R > 0$ ,  $\rho > 1$  et  $\theta_0 \in ]0, \pi[$  tels que  $V$  se prolonge analytiquement au domaine*

$$D_{R, \theta_0} = \{z \in \mathbb{C}^n, |z| > R, |\operatorname{Im}(z)| \leq \tan(\theta_0) |\operatorname{Re}(z)|\}$$

et.

$$\exists C_\rho > 0, \forall z \in D_{R, \theta_0}, |V(z)| \leq C_\rho \langle z \rangle^{-\rho}.$$

On remarque qu'en vertu de la formule de Cauchy, tout potentiel vérifiant cette hypothèse vérifie l'hypothèse 1. Ceci m'a permis de mettre en oeuvre dans ma thèse les techniques de Robert-Tamura combinées avec des résultats sur les résonances. Sous l'hypothèse 2, on déduit des travaux de Gérard et Martinez [GM89] que la fonction  $\lambda \mapsto f(\omega, \omega', \lambda, h)$  possède un prolongement méromorphe à un voisinage conique de l'axe réel, dont les pôles sont les résonances de  $P(h)$ . Si  $z_0(h) \in \mathbb{C}^- = \{z \in \mathbb{C}, \operatorname{Im} z < 0\}$  est une résonance simple de  $P(h)$  alors l'amplitude de diffusion s'écrit près de  $z_0(h)$

$$T(\omega, \omega', z, h) = \frac{T^{res}(\omega, \omega', h)}{z - z_0(h)} + T^{hol}(\omega, \omega', z, h) \quad (1.1.11)$$

avec  $z \mapsto T^{hol}(\omega, \omega', z, h)$  holomorphe près de  $z_0(h)$ . Dans le cas d'un puits dans une île, Lahmar-Benbernou [LB99] et Lahmar-Benbernou- Martinez [LBM99], ont étudié précisément ce résidu. Leur approche repose sur l'utilisation d'informations très précises sur les états résonnants dans ce contexte (cf [HS86]). Par la suite, Stefanov [Ste02] a obtenu une estimation a priori sur des potentiels réguliers à support compact généraux. En utilisant des estimations de résolvantes dues à Burq [Bur02] j'ai étendu le résultat de Stefanov au cas de potentiels de courte portée (cf [Mic03]).

**Théorème 1.1.3** *Supposons que le potentiel  $V$  vérifie l'hypothèse 2. Fixons  $0 < E_1 < E_2$  et soit  $z_0(h)$  une résonance simple de  $P(h)$  telle que  $0 < -\operatorname{Im} z_0(h) < h^{\frac{3n+5}{2}}$ ,  $E_1 \leq \operatorname{Re} z_0(h) \leq E_2$ . Supposons aussi que  $z_0(h)$  est la seule résonance dans l'ensemble*

$$\Omega(h) = \left\{ z \in \mathbb{C}; |\operatorname{Re} z - \operatorname{Re} z_0(h)| \leq h^{-\frac{3n+4}{2}} |\operatorname{Im} z_0(h)|, \right. \\ \left. 0 \leq -\operatorname{Im} z \leq h^{-n-2} |\operatorname{Im} z_0(h)| \right\}.$$

Soient  $(\omega, \omega') \in S^{n-1} \times S^{n-1}$  avec  $\omega' \neq \omega$ . Alors, il existe  $C > 0$  et  $h_0 > 0$  tels que pour tout  $0 < h < h_0$ , nous avons

$$|T^{res}(\omega, \omega', h)| \leq Ch^{-\frac{n-1}{2}} |\operatorname{Im} z_0(h)| \text{ et } |T^{hol}(\omega, \omega', z, h)| \leq Ch^{-\frac{n-1}{2}}, \forall z \in \tilde{\Omega}(h),$$

où

$$\tilde{\Omega}(h) = \left\{ z \in \mathbb{C}; |Re z - Re z_0(h)| \leq \frac{3}{20} h^{-\frac{3n+4}{2}} |Im z_0(h)|, \right. \\ \left. 0 \leq -Im z \leq 2|Im z_0(h)| \right\}.$$

Le premier travail que j'ai entrepris après ma thèse visait à obtenir des informations micro-locales sur le résidu  $T^{res}(\omega, \omega', h)$ , via l'étude des états résonnants associés.

## 1.2 Estimations microlocales des états résonnants et applications

On décrit ici des résultats obtenus en collaboration avec J.-F. Bony [BM04]. Dans toute cette partie, on supposera que le potentiel  $V$  vérifie l'hypothèse 2. On a vu précédemment que le résidu associé à une résonance simple  $z_0(h)$  ne pouvait pas exploser plus vite que  $h^{-\frac{n-1}{2}} |Im(z_0)|$ . On peut se demander sous quelles hypothèses cette estimation est améliorable et de quelle manière les directions  $\omega, \omega'$  entrent en jeu.

Supposons momentanément que le potentiel  $V$  est à support compact. On a alors la formule suivante pour l'amplitude de diffusion [PZ01] :

$$T(\omega, \omega', z, h) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ih^{-1}\sqrt{z}\langle x, \omega' \rangle} [h^2 \Delta, \chi_1] R(z, h) [h^2 \Delta, \chi_2] e^{ih^{-1}\sqrt{z}\langle x, \omega \rangle} dx \quad (1.2.1)$$

où  $R(z, h) : L^2_{comp} \rightarrow H^2_{loc}$  désigne le prolongement méromorphe de la résolvante de  $P(h)$  à un voisinage conique de l'axe réel. De plus, si on note  $P_\theta(h)$  l'opérateur obtenu à partir de  $P(h)$  par dilatation analytique hors du support de  $V$  (voir [SZ91]), on a

$$T(\omega, \omega', z, h) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{-ih^{-1}\sqrt{z}\langle x, \omega' \rangle} [h^2 \Delta, \chi_1] (P_\theta(h) - z)^{-1} [h^2 \Delta, \chi_2] e^{ih^{-1}\sqrt{z}\langle x, \omega \rangle} dx, \quad (1.2.2)$$

où  $\chi_1, \chi_2$  sont deux fonctions  $C^\infty$  à support compact, telles que  $V \prec \chi_1 \prec \chi_2$ . Supposons que  $z_0$  est une résonance simple et qu'il n'existe pas d'autre résonance dans le disque  $D$  centré en  $z_0$ , alors le résidu est donné par

$$T^{res}(\omega, \omega', h) = \langle [h^2 \Delta, \chi_1] \Pi_\theta [h^2 \Delta, \chi_2] e^{ih^{-1}\langle x, \omega \rangle}, e^{-ih^{-1}\langle x, \omega' \rangle} \rangle \quad (1.2.3)$$

où  $\Pi_\theta$  est le projecteur spectral associé à  $z_0$ . De plus, comme  $\Pi_\theta$  est un opérateur de rang un, il existe  $u_\theta, v_\theta \in L^2$  tels que  $\Pi_\theta = \langle \cdot, v_\theta \rangle u_\theta$  et on peut montrer que  $(P_\theta - z_0)u_\theta = 0$  et  $(P_{-\theta} - \bar{z}_0)v_\theta = 0$ . Par suite,

$$T^{res}(\omega, \omega', h) = \langle [h^2 \Delta, \chi_1] u_\theta, e^{-ih^{-1}\langle x, \omega' \rangle} \rangle \langle v_\theta, [h^2 \Delta, \chi_2] e^{ih^{-1}\langle x, \omega \rangle} \rangle.$$

Comme par ailleurs les fonctions  $[h^2 \Delta, \chi_*] e^{ih^{-1}\langle x, \omega^* \rangle}$  sont microlocalisées près de  $\{(x, \xi); R_1 < |x| < R_2, \xi/|\xi| \sim \omega^*\}$ , on peut obtenir des informations sur le résidu  $T^{res}$  en montrant que pour certaines directions, les états résonnants sont microlocalisés hors de cet ensemble.

Passons maintenant à une description précise des résultats démontrés dans [BM04]. On suppose désormais que  $P(h)$  est un opérateur  $h$ -différentiel sur  $\mathbb{R}^n$  :

$$P(h) = \sum_{|\alpha| \leq 2} a_\alpha(x; h) (hD_x)^\alpha, \quad (1.2.4)$$

avec  $a_\alpha(x; h) \in S_n^{cl}(1)$  et  $a_\alpha(x; h)$  indépendant de  $h$  pour  $|\alpha| = 2$ . On suppose que  $P(h)$  est formellement auto-adjoint sur  $L^2(\mathbb{R}^n)$ , i.e.

$$\forall u, v \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n) \quad \int (P(h)u)\bar{v} dx = \int \overline{u(P(h)v)} dx. \quad (1.2.5)$$

On suppose aussi que  $P(h)$  est elliptique, c'est à dire

$$\sum_{|\alpha|=2} a_\alpha(x)\xi^\alpha \geq |\xi|^2/C. \quad (1.2.6)$$

Afin de définir les résonances, on suppose que les coefficients  $a_\alpha(x; h)$  se prolongent holomorphiquement en  $x$  à un domaine

$$\Gamma = \{x \in \mathbb{C}^n; |\operatorname{Im} x| \leq \delta_0 \langle \operatorname{Re} x \rangle \text{ and } |x| \geq R_0\}, \quad (1.2.7)$$

avec  $R_0 > 0$ ,  $\delta_0 \in ]0, 1[$ . On suppose en outre que  $P$  converge vers  $-h^2\Delta$  à l'infini, au sens suivant :

$$\sum_{|\alpha| \leq 2} a_\alpha(x; h)\xi^\alpha \longrightarrow \xi^2, \quad (1.2.8)$$

lorsque  $|x| \rightarrow +\infty$ ,  $x \in \Gamma$ , uniformément par rapport à  $h$ . Sous ces hypothèses, il est clair que  $P(h)$  est autoadjoint avec domaine  $H^2(\mathbb{R}^n)$  et on peut définir les résonances associées à  $P(h)$  par la méthode des dilatations analytiques.

Soit  $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$  un champ de vecteur régulier tel que  $F(x) = 0$  si  $|x| \leq R_0$  et  $F(x) = x$  pour  $|x|$  assez grand. Pour  $\nu \in \mathbb{R}$  petit, on considère l'opérateur unitaire  $U_\nu$  on  $L^2(\mathbb{R}^n)$  défini par :

$$U_\nu \varphi(x) = \det(1 + \nu dF(x))^{-\frac{1}{2}} \varphi(x + \nu F(x)).$$

On déduit de l'hypothèse d'analyticité des coefficients  $a_\alpha$  que  $U_\nu P(h)U_\nu^{-1}$  a des coefficients analytiques par rapport à  $\nu$  près de 0 et peut être prolongé à des valeurs complexes de  $\nu$ . Pour  $\nu = i\theta$ , avec  $\theta > 0$  on obtient ainsi un opérateur différentiel noté  $P_\theta(h)$ . Il est bien connu que le spectre de  $P_\theta(h)$  est discret dans le secteur  $S_\theta = \{z \in \mathbb{C}; \operatorname{Re} z > 0 \text{ and } -2\theta < \arg z \leq 0\}$  (voir [SZ91]) et par définition, les résonances de  $P(h)$  sont les valeurs propres de  $P_\theta(h)$ . On appelle multiplicité d'une résonance  $z_0(h)$  le rang du projecteur

$$\Pi_\theta = \frac{1}{2i\pi} \int_{\gamma(z_0)} (z - P_\theta(h))^{-1} dz \quad (1.2.9)$$

où  $\gamma(z_0)$  désigne le bord d'un disque  $D$  centré en  $z_0$  orienté positivement, suffisamment petit pour que  $z_0$  soit la seule résonance dans  $\overline{D}$ .

### 1.2.1 Estimations microlocales des états résonnants

On note  $p(x, \xi; h) \in S_{2n}^{cl}(\langle \xi \rangle^2)$  le symbole de Weyl de  $P(h)$  et  $p_0(x, \xi) = \sum_{|\alpha| \leq 2} a_{\alpha,0}(x)\xi^\alpha$  son symbole principal. On note  $\mathbb{H}_{p_0} = \partial_\xi p_0 \cdot \partial_x - \partial_x p_0 \cdot \partial_\xi$  le champ Hamiltonien associé à  $p_0$  et  $\mathbb{R} \ni t \mapsto \exp(t\mathbb{H}_{p_0})$ ,  $t \in \mathbb{R}$  le flot Hamiltonien correspondant. On définit les zones entrantes et sortantes à l'énergie  $E > 0$  par

$$\mathcal{T}_\pm(E) = \{(x, \xi) \in p_0^{-1}(E); \exp(t\mathbb{H}_{p_0})(x, \xi) \rightarrow \infty, t \rightarrow \mp\infty\}.$$

Ainsi, l'ensemble des trajectoires captées d'énergie  $E$  est le compact de  $\mathbb{R}^{2n}$  :

$$\mathcal{T}(E) = \mathcal{T}_+(E) \cap \mathcal{T}_-(E) = \{(x, \xi) \in p_0^{-1}(E); t \mapsto \exp(t\mathbb{H}_{p_0})(x, \xi) \text{ est borné sur } \mathbb{R}\}.$$

En notant  $\mathcal{T}([a, b]) = \overline{\bigcup_{E \in [a, b]} \mathcal{T}(E)}$ , on donne une preuve nouvelle d'un résultat de Stefanov [Ste02] sur la localisation des états résonnants

**Théorème 1.2.1 (Stefanov)** *Soient  $E_0 > 0$  un niveau d'énergie fixé et  $C > 0$ . Soient  $\epsilon > 0$  et  $h_0 > 0$  assez petits. Soient  $h \in ]0, h_0]$ ,  $\theta = h/C$  et  $z \in \mathbb{C}$  une résonance de  $P$  telle que  $\operatorname{Re} z \in [E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon]$ ,  $|\operatorname{Im} z| < \theta$ . Soit  $u_\theta \in L^2(\mathbb{R}^n)$  un état résonnant associé à  $z$  :*

$$(P_\theta - z)u_\theta = 0. \quad (1.2.10)$$

Si  $w(x, \xi) \in S_{2n}(1)$  est supporté hors de  $\mathcal{T}([E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon])$ , alors

$$\operatorname{Op}_h^w(w)u_\theta = \mathcal{O}\left(\sqrt{\frac{|\operatorname{Im} z|}{h}} + h^\infty\right) \|u_\theta\|. \quad (1.2.11)$$

Ce résultat ne fournit d'information réellement intéressante que pour des résonances très proches de l'axe réel. L'objet de notre travail a consisté à identifier une zone de l'espace des phases hors de laquelle les états résonnants sont microlocalisés, ceci sous une hypothèse "raisonnable" sur la taille des résonances. Pour  $R > 0$ ,  $\epsilon > 0$  et  $\sigma \in [-1, 1]$ , on définit les cônes entrant et sortant :

$$\Gamma_\pm(R, \epsilon, \sigma) = \{(x, \xi) \in T^*(\mathbb{R}^n); |x| > R, |p_0(x, \xi) - E_0| < \epsilon \text{ et } \pm \langle x, \xi \rangle > \pm \sigma |x| |\xi|\}.$$

Le théorème suivant, principal résultat de [BM04], affirme que les états résonnants de  $P(h)$  sont sortants. Un résultat analogue a été démontré par Nonnenmacher et Zworski dans le langage des mesures de défaut semiclassiques (c.f. Théorème 4 de [NZ09]).

**Théorème 1.2.2** *Soient  $E_0 > 0$  un niveau d'énergie fixé et  $C > 0$ . Soient  $\epsilon > 0$  et  $h_0 > 0$  assez petits. Soient  $h \in ]0, h_0]$  et  $\theta \in ]h/C, Ch \ln(1/h)[$ . Soit  $u_\theta$  un état résonnant associé à une résonance  $z$  telle que  $\operatorname{Re} z \in [E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon]$ ,  $|\operatorname{Im} z| < \epsilon\theta$ . Fixons  $w(x, \xi) \in S(\mathbb{R}^{2n}, 1)$  et supposons qu'il existe  $T > 0$  tel que  $\exp(-TH_{p_0})(\operatorname{supp}(w)) \subset \Gamma_-(R, \epsilon, \sigma)$  avec  $R \gg 1$  et  $\sigma < 0$ . Alors, pour  $h > 0$  assez petit, on a*

$$\|w(x, hD_x)u_\theta\| = \mathcal{O}(h^\infty) \|u_\theta\|. \quad (1.2.12)$$

On remarque en particulier que si  $w \in C_0^\infty(T^*(\mathbb{R}^n))$  vérifie  $\operatorname{supp}(w) \subset \overline{\bigcup_{E \in [E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon]} \mathcal{T}_+(E)}^C$ , alors il vérifie les hypothèses du Théorème 1.2.2. Par ailleurs, on remarque la présence du terme  $\|u_\theta\|$  dans le membre de droite de (1.2.12). Pour pouvoir affirmer que  $w(x, hD_x)u_\theta$  est réellement petit on aura donc besoin d'estimations a priori de  $\|u_\theta\|$ .

En combinant le théorème ci-dessus et la formule (1.2.3), on verra par la suite comment obtenir une estimation du résidu de l'amplitude de diffusion.

Donnons maintenant quelques idées des démonstrations.

## Transformation FBI

On utilise la transformation de Fourier-Bros-Iagolnitzer. Le résultat principal de cette section est une légère modification de la Proposition 3.1 de Martinez [Mar02]. Pour  $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$ , la transformée FBI de  $u$  est donnée par

$$Tu(x, \xi; h) = \alpha_n(h) \int e^{i(x-y)\xi/h - (x-y)^2/2h} u(y) dy, \quad (1.2.13)$$

avec  $\alpha_n(h) = 2^{-n/2}(\pi h)^{-3n/4}$ . Alors,  $Tu \in C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$  et  $e^{\xi^2/h} Tu(x, \xi; h)$  est une fonction holomorphe de la variable  $z = x - i\xi$ . De plus, si  $u \in L^2(\mathbb{R}^n)$  alors  $\|Tu\|_{L^2(\mathbb{R}^{2n})} = \|u\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}$ .

Soit  $A$  un opérateur  $h$ -différentiel de symbole de Weyl  $a(x, \xi; h) \sim \sum_{j \geq 0} a_j(x, \xi) h^j \in S_{cl}(\mathbb{R}^{2n}, \langle \xi \rangle^d)$ . Comme  $a$  est polynomial en  $\xi$  à coefficients dans  $S(\mathbb{R}^n, 1)$ , on peut définir une extension presque analytique  $\tilde{a}(x, \xi; h) \in S_{cl}(D_\epsilon \times \mathbb{C}^n, \langle \xi \rangle^d)$  de  $a$  dans  $D_\epsilon \times \mathbb{C}^n$ , avec  $D_\epsilon = \{x \in \mathbb{C}^n; |\operatorname{Im} x| < \epsilon\}$ , qui vérifie

$$\tilde{a}|_{\mathbb{R}^{2n}} = a, \quad (1.2.14)$$

$$\partial_{\bar{x}} \tilde{a} = \mathcal{O}(|\operatorname{Im} x|^\infty) \langle \xi \rangle^d. \quad (1.2.15)$$

**Théorème 1.2.3 (Martinez)** *Soit  $f(x, \xi) \in S(\mathbb{R}^{2n}, 1)$  et  $G(x, \xi) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ . Il existe un symbole  $q(x, \xi; t, h) \sim \sum_{j \geq 0} q_j(x, \xi; t) h^j \in S_{cl}(\mathbb{R}^{2n}, \langle \xi \rangle^d)$  uniformément par rapport à  $t$  et un opérateur  $R(t, h)$  tels que pour tout  $u, v \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ , on a*

$$\langle f e^{-tG/h} \mathbb{T} \operatorname{Op}_h^w(a) u, e^{-tG/h} \mathbb{T} v \rangle_{L^2(\mathbb{R}^{2n})} = \langle (q(x, \xi; t, h) + R(t, h)) e^{-tG/h} \mathbb{T} u, e^{-tG/h} \mathbb{T} v \rangle_{L^2(\mathbb{R}^{2n})}, \quad (1.2.16)$$

où  $\operatorname{supp} q_j \subset \operatorname{supp} f$  pour tout  $j \in \mathbb{N}$ , et

$$q_0(x, \xi; t) = f(x, \xi) \tilde{a}_0(x + 2t \partial_z G(x, \xi), \xi - 2it \partial_z G(x, \xi)), \quad (1.2.17)$$

$$\begin{aligned} q_1(x, \xi; t) &= \left( f a_1 - f \partial_{xx}^2 a_0 / 4 - f \partial_{\xi\xi}^2 a_0 / 4 - \partial_x f \partial_x a_0 / 2 - \partial_\xi f \partial_\xi a_0 / 2 \right) (x, \xi) \\ &\quad + \frac{i}{2} \left( \partial_\xi a_0 \partial_x f - \partial_x a_0 \partial_\xi f \right) (x, \xi) + \mathcal{O}(t), \end{aligned} \quad (1.2.18)$$

(ici  $\partial_z = (\partial_x + i \partial_\xi) / 2$ ), et

$$\| \langle \xi \rangle^\sigma R(t, h) \langle \xi \rangle^{-d-\sigma} \|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^n))} = \mathcal{O}(h^\infty + h^{-3n/2} |t|^\infty e^{2 \sup |G||t|/h}), \quad (1.2.19)$$

pour tout  $\sigma \in \mathbb{R}$ , uniformément par rapport à  $t$  et  $h$  assez petits.

### Preuve du Théorème 1.2.2

Soient  $z \in \mathbb{C}$ ,  $u_\theta \in H^2(\mathbb{R}^n)$  tels que  $(P_\theta - z)u_\theta = 0$  et  $w \in S^{2n}(1)$  comme dans le Théorème 1.2.2. Pour simplifier on suppose ici que  $\operatorname{supp}(w) \subset \Gamma_-(R, \epsilon, \sigma)$  (c'est à dire  $T = 0$ ). Pour  $N \in \mathbb{N}$ , soient  $w_j(x, \xi) \in S(1)$ ,  $j = 1, \dots, N, \infty$  tels que  $w \prec w_1 \prec \dots \prec w_N \prec w_\infty$ , où l'on utilise la notation  $g_1 \prec g_2$  pour signifier que  $g_2 = 1$  près du support de  $g_1$ . Prenons  $\theta$  tel que  $h/C < \theta < Ch \ln(1/h)$  et  $t = L\theta$  avec  $L \gg 1$ . Pour  $G \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n})$ , on a

$$0 = \langle w_1^2(x, \xi) e^{-tG/h} \mathbb{T} (P_\theta - z) u_\theta, e^{-tG/h} \mathbb{T} u_\theta \rangle_{L^2(\mathbb{R}^{2n})} \quad (1.2.20)$$

et l'on déduit du Théorème 1.2.3

$$\langle (q_\theta - z w_1^2) e^{-tG/h} \mathbb{T} u_\theta, e^{-tG/h} \mathbb{T} u_\theta \rangle = \mathcal{O}((h^\infty + t^\infty h^{-3n/2}) e^{\sup |G||t|/h}) \| e^{-tG/h} \mathbb{T} u_\theta \|^2, \quad (1.2.21)$$

où

$$q_\theta(x, \xi; t, h) = q_{\theta,0}(x, \xi; t) + h q_{\theta,1}(x, \xi; 0) + (h|t| + h^2) r_\theta(x, \xi; t, h), \quad (1.2.22)$$

avec

$$\begin{aligned} q_{\theta,0}(x, \xi; t) &= w_1^2(x, \xi) \widetilde{p_{\theta,0}}(x + 2t \partial_z G(x, \xi), \xi - 2it \partial_z G(x, \xi)) \\ q_{\theta,1}(x, \xi; t) &= \left( w_1^2 p_{\theta,1} - w_1^2 \partial_{xx}^2 p_{\theta,0} / 4 - w_1^2 \partial_{\xi\xi}^2 p_{\theta,0} / 4 - \partial_x w_1^2 \partial_x p_{\theta,0} / 2 - \partial_\xi w_1^2 \partial_\xi p_{\theta,0} / 2 \right) (x, \xi) \\ &\quad + \frac{i}{2} \mathbb{H}_{p_{\theta,0}} w_1^2(x, \xi) + \mathcal{O}(t). \end{aligned} \quad (1.2.23)$$



et  $r_\theta \in S(1)$  uniformément par rapport à  $t$ ,  $\theta$  et  $\text{supp } r_\theta \subset \text{supp } w_1$ . En utilisant la formule de Taylor, on montre facilement que

$$\text{Im } q_{\theta,0}(x, \xi; t) = -w_1^2(x, \xi)H_{p_0}(tG(x, \xi) + \theta F(x) \cdot \xi) + w_1^2(x, \xi)O(\theta^2 + t^2), \quad (1.2.24)$$

et

$$\text{Im } q_{\theta,1}(x, \xi; 0) = \frac{1}{2}H_{p_0}w_1^2(x, \xi) + w_2^2(x, \xi)O(\theta). \quad (1.2.25)$$

Notons  $\psi(x, \xi) = F(x) \cdot \xi$ . En prenant la partie imaginaire de (1.2.21) et en utilisant (1.2.24), (1.2.25), il vient

$$\begin{aligned} & \langle w_1^2(H_{p_0}(tG + \theta\psi) + \text{Im}(z))e^{-tG/h}Tu_\theta, e^{-tG/h}Tu_\theta \rangle \\ &= h \langle w_1 H_{p_0} w_1 e^{-tG/h}Tu_\theta, e^{-tG/h}Tu_\theta \rangle + O(\theta^2) \|w_2 e^{-tG/h}Tu_\theta\|^2 \\ & \quad + O(h^\infty e^{\frac{t}{h} \sup |G|}) \|e^{-tG/h}Tu_\theta\|^2 \end{aligned} \quad (1.2.26)$$

L'idée principale de la preuve consiste alors à construire  $w_1$  et  $G$  tels que  $H_{p_0}(tG + \theta\psi) \geq C\theta$  et  $H_{p_0}w_1 \leq 0$ .

Commençons par  $w_1$ . Soit  $\sigma \in ]-1, 0[$  et  $\alpha \in C_0^\infty(\mathbb{R}; [0, 1])$  une fonction décroissante telle que  $\alpha(s) = 1$  si  $s < \sigma$  et  $\alpha(s) = 0$  si  $s > \sigma/2$ . On définit  $w_1$  par la formule suivante

$$w_1(x, \xi) = \rho(|x|)\varphi(p_0(x, \xi))\alpha\left(\frac{x \cdot \xi}{|x||\xi|}\right), \quad (1.2.27)$$

où  $\varphi \in C_0^\infty([E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon])$  et  $\rho \in C^\infty(\mathbb{R}; [0, 1])$  est croissante et vérifie  $\rho(x) = 1$  pour  $x > R$  et  $\rho(x) = 0$  pour  $x < R - 1$ . Il est évident que  $w_1 \in S(1)$  et un calcul direct permet de monter le lemme suivant :

**Lemme 1.2.4** *Pour  $\sigma < 0$  suffisamment proche de 0 et  $R > 0$  assez grand, on a  $H_{p_0}w_1 \leq 0$ .*

Evidemment, la même construction peut se faire pour les  $w_j$ ,  $j = 2, \dots, N, \infty$ .

Passons maintenant à la construction de la fonction  $G(x, \xi)$ . La première étape consiste à fabriquer une fonction de fuite sur un compact en dehors des trajectoires captées. Le lemme suivant est dû à C. Gérard et Sjöstrand [GS87]

**Lemme 1.2.5** *Supposons que  $K \subset p_0^{-1}([E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon])$  est un compact tel que  $K \cap \mathcal{T}([E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon]) = \emptyset$ . Alors, il existe une fonction  $f(x, \xi) \in C_b^\infty(\mathbb{T}^*(\mathbb{R}^n))$  telle que  $H_{p_0}f \geq 0$  sur  $p_0^{-1}([E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon])$  et  $H_{p_0}f > 1$  sur  $K$ .*

Comme  $x \cdot \xi$  est une fonction de fuite à l'infini et  $F(x) = x$  pour  $x$  assez grand, alors pour  $R > 0$  assez grand, on a

$$H_{p_0}(F(x) \cdot \xi) \geq \begin{cases} c > 0 & \text{for } |x| \geq R, \\ -M & \text{for } |x| \leq R, \end{cases} \quad (1.2.28)$$

sur  $p_0^{-1}([E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon])$ . Fixons maintenant  $K = \text{supp } w_\infty \cap \overline{B(0, R_0)} \subset p_0^{-1}([E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon]) \cap \mathcal{T}([E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon])^c$  et considérons  $\chi_1 \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n, [0, 1])$  telle que  $\chi_1(x) = 1$  pour  $|x| \leq R + 1$  et  $\chi_2 \in C_0^\infty(\mathbb{R}; [0, 1])$  telle que  $\chi_2(E) = 1$  on  $[E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon]$ . On définit la fonction  $G$  par

$$G(x, \xi) = \chi_1(x)\chi_2(p_0(x, \xi))f(x, \xi) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2n}). \quad (1.2.29)$$



où  $f$  est la fonction définie par le Lemme 1.2.5. Comme la fonction  $\chi_1$  peut être choisi arbitrairement plate, la quantité

$$\mu = \sup |\chi_2(p_0(x, \xi))f(x, \xi)H_{p_0}\chi_1(x)|, \quad (1.2.30)$$

peut être rendue aussi petite que voulu. Comme  $t = L\theta$ , sur le support de  $w_\infty$ , on a

$$H_{p_0}(tG(x, \xi) + \theta F(x) \cdot \xi) \geq \theta \begin{cases} -L\mu + c & \text{for } |x| \geq R_0, \\ L - L\mu - M & \text{for } |x| \leq R_0. \end{cases} \quad (1.2.31)$$

En prenant  $L \geq 2M$  et  $\mu$  assez petit, et en supposant  $-\epsilon\theta < \text{Im}(z) < 0$  avec  $\epsilon$  assez petit, il vient

$$H_{p_0}(tG(x, \xi) + \theta F(x) \cdot \xi) \geq \theta c/2 < -\text{Im}(z)/2, \quad (1.2.32)$$

sur  $\text{supp } w_\infty$ .

Revenons maintenant à l'équation (1.2.26). En utilisant le Lemme 1.2.4, l'équation (1.2.32) et comme  $G$  est à support compact, il vient

$$\|w_1 e^{-tG/h} T u_\theta\|^2 \leq C\theta \|w_2 e^{-tG/h} T u_\theta\|^2 + O(h^\infty) \|T u_\theta\|^2 \quad (1.2.33)$$

En itérant cet argument, on obtient facilement  $\|w_1 T u_\theta\| = O(h^\infty) \|u_\theta\|$ , puis l'estimation annoncée.

### Preuve du Théorème 1.2.1

La preuve utilise les mêmes arguments que pour le Théorème 1.2.2. Pour  $N \in \mathbb{N}$ , soient  $w \prec w_0 \prec \dots \prec w_N \prec w_\infty \in S(\mathbb{R}^{2n}, 1)$  des fonctions telles que  $\text{supp } w_\infty \cap \Gamma = \emptyset$  et soient  $g_0 \prec \dots \prec g_N \prec g_\infty \in C_0^\infty([E_0 - 3\epsilon, E_0 + 3\epsilon])$  telles que  $g_0 = 1$  près de  $[E_0 - 2\epsilon + E_0 + 2\epsilon]$ . En appliquant le Théorème 1.2.3 avec  $f = g_0^2(p_0(x, \xi))$  et  $t = \tilde{C}h$ , il vient

$$\begin{aligned} 0 &= \text{Im} \langle g_0^2(p_0(x, \xi)) e^{-tG/h} T(P_\theta - z)u_\theta, e^{-tG/h} T u_\theta \rangle \\ &= \text{Im} \langle (q_\theta(x, \xi; \tilde{C}h, h) + \mathcal{O}(h^\infty) - z) e^{-tG/h} T u_\theta, e^{-tG/h} T u_\theta \rangle, \end{aligned} \quad (1.2.34)$$

avec

$$q_\theta(x, \xi; \tilde{C}h, h) = \sum_{j=0}^{\infty} q_{\theta,j}(x, \xi; \tilde{C}h) h^j.$$

En travaillant comme pour la preuve de (1.2.24) et (1.2.25), on peut choisir la fonction  $G(x, \xi) \in C_0^\infty(\text{supp } w_2)$  comme dans (1.2.29) telle que :

$$\text{Im } q_{\theta,0}(x, \xi; \tilde{C}h) \leq -g_0^2(p_0)w_0^2 h + \mathcal{O}(h^2)g_1^2(p_0)w_1^2. \quad (1.2.35)$$

Commet  $\text{Im } q_j(x, \xi; 0) = 0$ , on a aussi

$$\text{Im } q_{\theta,j}(x, \xi; \tilde{C}h) = \mathcal{O}(h^2)g_1^2(p_0)w_1^2. \quad (1.2.36)$$

pour  $j \geq 1$ . Combiné avec (1.2.34), ceci implique

$$\|g_0(p_0)w_0 e^{-tG/h} T u_\theta\|^2 = \mathcal{O}(h) \|g_1(p_0)w_1 e^{-tG/h} T u_\theta\|^2 + \mathcal{O}\left(\frac{|\text{Im } z|}{h} + h^\infty\right) \|e^{-tG/h} T u_\theta\|^2, \quad (1.2.37)$$

dont on déduit facilement par récurrence

$$\|g_0(p_0)w_0Tu_\theta\|^2 = \mathcal{O}\left(\frac{|\operatorname{Im} z|}{h} + h^\infty\right) \|Tu_\theta\|^2, \quad (1.2.38)$$

En travaillant de manière similaire sur la partie réelle et en utilisant l'ellipticité de  $\operatorname{Op}(Re(p_\theta - z)(1 - g_0)(p_0))$ , on démontre que

$$\|(1 - g(p_0))w_0Tu_\theta\|^2 = \mathcal{O}(h^\infty) \|Tu_\theta\|^2. \quad (1.2.39)$$

Il reste alors très peu de travail pour établir le théorème.

## 1.2.2 Application à l'étude des résidus de l'amplitude de diffusion

On suppose dans cette section que  $P(h)$  est un opérateur de Schrödinger  $P(h) = -h^2\Delta + V(x)$  où le potentiel  $V(x)$  vérifie l'hypothèse 2. En particulier, l'amplitude de diffusion  $f(\omega, \omega', \lambda, h)$  est bien définie et possède un prolongement méromorphe à un voisinage conique de l'axe réel dont les pôles sont les résonances de  $P(h)$ . De plus la multiplicité de chaque pôle est exactement la multiplicité de la résonance.

Dans cette section, nous supposons que  $z_0(h)$  est une résonance *simple* de  $P$  telle que  $\operatorname{Re} z_0 \in [E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon]$  et  $0 < -\operatorname{Im} z_0 < Ch \ln(1/h)$ . L'amplitude de diffusion peut donc s'écrire sous la forme (1.1.11).

**Définition 1.2.6** *On dit que  $\omega \in \mathbb{S}^{n-1}$  est une direction entrante (resp. direction sortante) pour l'énergie  $E_0$  s'il existe  $\epsilon, R > 0$  et  $W \subset \mathbb{S}^{n-1}$  voisinage de  $\omega$ , tels que pour tout  $(x, \xi) \in p^{-1}([E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon])$ ,*

$$|x| \geq R \text{ et } \frac{\xi}{|\xi|} \in W \implies \lim_{t \rightarrow -\infty} \exp(tH_{p_0})(x, \xi) = \infty. \quad (1.2.40)$$

(resp.  $\lim_{t \rightarrow +\infty} \exp(tH_{p_0})(x, \xi) = \infty$  lorsque  $t \rightarrow +\infty$ )

Pour  $\theta \geq C|\operatorname{Im} z_0|$  avec  $C > 0$  assez grand, on rappelle que  $\Pi_\theta$  désigne le projecteur spectral associé à la résonance  $z_0$  défini en (1.2.9).

**Théorème 1.2.7** *Soient  $E_0 > 0$  et  $\omega, \omega' \in \mathbb{S}^{n-1}$  tels que  $\omega \neq \omega'$ . Si  $\omega$  est une direction sortante ou si  $\omega'$  est une direction entrante, alors il existe  $\epsilon, C' > 0$  tels que pour toute résonance simple  $z_0 \in [E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon] - i[0, \theta/C']$  avec  $h/C < \theta < Ch \ln(1/h)$ ,  $C > 0$  on a*

$$T^{res}(\omega, \omega', h) = \mathcal{O}(h^\infty) \|\Pi_\theta\|. \quad (1.2.41)$$

La preuve de ce résultat est très simple. Pour alléger les notations, on supposera que  $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ . Dans ce cas, on a vu que le résidu  $T^{res}$  s'écrit

$$T^{res}(\omega, \omega', h) = \langle [h^2\Delta, \chi_1]u_\theta, e^{-ih^{-1}\langle x, \omega' \rangle} \rangle \langle v_\theta, [h^2\Delta, \chi_2]e^{ih^{-1}\langle x, \omega \rangle} \rangle. \quad (1.2.42)$$

où  $v_\theta$  est solution de  $(P_{-\theta} - \bar{z}_0)v_\theta = 0$ .

Supposons que  $\omega'$  est entrante. Soit  $W$  comme dans la définition 1.2.6 et soit  $R_0 > 0$  tel que  $\operatorname{supp}(\chi'_1) \subset \{2R_0 < |x| < 3R_0\}$ . Soit  $w \in S_{2n}(1)$  telle que  $\operatorname{supp} w \subset p^{-1}([E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon]) \cap \{\frac{\xi}{|\xi|} \in W\} \cap \{R_0 < |x| < 4R_0\}$  et  $w = 1$  sur  $p^{-1}([E_0 - \epsilon/2, E_0 + \epsilon/2]) \cap \{\frac{\xi}{|\xi|} \in W'\} \cap \{2R_0 < |x| < 3R_0\}$

où  $\omega' \in W' \subset W$ . Comme  $\omega'$  est entrante et  $\text{supp}(w)$  est compact, alors il existe  $T > 0$  tel que  $\exp(-TH_{p_0})(\text{supp}(w))$  est contenu dans un cône rentrant  $\Gamma_-(R, \epsilon, \sigma)$ ,  $\sigma < 0$ . Or,

$$T^{res}(\omega, \omega'; h) = \langle [h^2\Delta, \chi_1] \text{Op}_h(w)u_\theta, e^{-ih^{-1}\langle x, \omega' \rangle} \rangle \langle v_\theta, [h^2\Delta, \chi_2]e^{ih^{-1}\langle x, \omega \rangle} \rangle + \mathcal{O}(h^\infty)\|\Pi_\theta\| \quad (1.2.43)$$

et on déduit donc du Théorème 1.2.2 que

$$T^{res}(\omega, \omega'; h) = \mathcal{O}(h^\infty)\|\Pi_\theta\|. \quad (1.2.44)$$

**Remarque 1.2.8** *Dans le cas général où  $V$  est à courte portée, la formule (1.2.42) n'est plus valable et il faut utiliser une formule de représentation de la matrice de diffusion due à Isozaki et Kitada.*

### 1.2.3 Estimation des projecteurs spectraux

Pour être complètes, les estimations microlocales des états résonnants que nous avons données nécessitent une estimation a priori des projecteurs spectraux  $\Pi_\theta$ . En effet, contrairement au cas d'un opérateur autoadjoint, les projecteurs spectraux ne sont pas nécessairement de norme 1. Leur norme dépend donc de  $h$  et rien n'assure a priori qu'elle reste contrôlée. On donne dans cette partie quelques exemples où c'est le cas.

#### Cas de résonances à distance $h^M$

On considère ici le cas où  $z_0$  est une résonance de  $P(h)$  proche de l'axe réel et isolée des autres résonances.

**Proposition 1.2.9** *Soient  $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ ,  $E_0 > 0$  et  $C > 0$ . Il existe  $M_1 > 0$  assez grand et  $h_0 > 0$  tels que : si  $z_0$  est une résonance simple de  $P(h)$  vérifiant  $\text{Res}(P) \cap D(E_0, h^{M_1}) = \{z_0\}$  et  $|\text{Im } z_0| \leq Ch^{M_2}$  avec  $M_2 \geq M_1 + 2n + 2$ , alors*

$$\|\Pi_\theta\| = \mathcal{O}(1)$$

uniformément par rapport à  $h \in ]0, h_0]$  et  $h/C < \theta < Ch \log(1/h)$ .

*Preuve.* Partant de la définition (1.2.9), il s'agit d'obtenir des estimations convenables de la résolvante tordue  $(P_\theta - z)^{-1}$  sur le contour  $\partial D \subset \mathbb{C}$ . Le point de départ est le principe du maximum semiclassique (c.f. [TZ98, TZ00], [Ste01]) dont on rappelle une version ici :

**Lemme 1.2.10 [Stefanov]** *Soient  $k, n^\sharp > \text{fixés}$ . Pour  $h \in ]0, 1]$ , soient  $a(h) < b(h)$ . Supposons que  $F(z, h)$  est une fonction holomorphe de la variable  $z$  dans un voisinage de*

$$\Omega(h) = [a(h) - 5w(h), b(h) + 5w(h)] + i[-S_-(h), S_+(h)h^{-n^\sharp - \epsilon}], \quad (1.2.45)$$

avec  $0 < S_-(h) \leq S_+(h) \leq w(h)h^{\frac{3}{2}n^\sharp + 2\epsilon}$ ,  $\epsilon > 0$  et  $w(h) \rightarrow 0$  lorsque  $h \rightarrow 0$ . Supposons en outre qu'il existe une fonction  $h \mapsto M(h)$  telle que  $\lim_{h \rightarrow 0} M(h) = +\infty$  et telle que  $F(z, h)$  vérifie les inégalités suivantes :

$$\begin{aligned} |F(z, h)| &\leq Ce^{Ch^{-n^\sharp} \ln(1/h)} \text{ sur } \Omega(h) \\ |F(z, h)| &\leq M(h) \text{ sur } [a(h) - 5w(h), b(h) + 5w(h)] - iS_-(h). \end{aligned} \quad (1.2.46)$$

Alors, il existe  $h_0 > 0$  tel que pour tout  $h \in ]0, h_0]$ , on a

$$|F(z, h)| \leq 2e^3 M(h), \quad \forall z \in [a(h) - w(h), b(h) + w(h)] + i[-S_-(h), S_+(h)h^{-n^\sharp - \epsilon}]. \quad (1.2.47)$$

Afin d'appliquer ce lemme, on a besoin d'estimations exponentielles de la résolvante dans le plan complexe. On utilise pour cela une légère modification d'un Lemme de Tang et Zworski [TZ98, TZ00] au cas où l'angle de la dilatation dépend de  $h$ .

**Lemme 1.2.11** *Soit  $C > 0$ . Supposons que  $h/C < \theta < Ch \log(1/h)$  et soit  $\Omega \subset \mathbb{C}$  un domaine simplement connexe et relativement compact. Pour  $E \in [E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon]$ , on note  $\Omega_\theta = E + \theta\Omega$ . Soit  $g(h)$  une fonction strictement positive telle que  $g(h) \ll \theta$ . Alors, il existe  $C_2 > 0$  tel que*

$$\forall z \in \Omega_\theta \setminus \bigcup_{z_j \in \text{Res}(P) \cap \Omega_\theta} D(z_j, g(h)), \quad \|(P_\theta - z)^{-1}\| \leq C_2 e^{C_2 h^{-n} \log \frac{\theta}{g(h)}}.$$

*Preuve.* Voir [BM04] □

Considérons maintenant la fonction  $F(z, h) = \frac{z - z_0(h)}{z - \bar{z}_0(h)} (P_\theta - z)^{-1}$  où  $\tilde{z}_0(h) = \bar{z}_0(h) + 2ih^{M_2}$ . C'est une fonction holomorphe sur

$$\Omega(h) = \{z \in \mathbb{C}; |\text{Re } z - \text{Re } z_0| < 2h^{M_1}, -h^{M_1 - n - 2} < \text{Im } z < h^{M_1}\}.$$

De plus, en suivant la preuve de la Proposition 3.1 de [Ste03] avec  $\theta_0 = h \ln(1/h)$ , on peut montrer que

$$\|(P_\theta - z)^{-1}\| \leq \frac{2}{\text{Im } z}, \quad (1.2.48)$$

pour tout  $z$  vérifiant  $\text{Im } z > 2e^{-h^{-1/3}}$ , ce qui implique  $\|F(z, h)\| \leq Ch^{-M_1}$  sur  $\text{Im } z = h^{M_1}$ . Par ailleurs, on déduit du Lemme 1.2.11 que  $\|F(z, h)\| \leq Ce^{Ch^{-n} \ln(1/h)}$  sur  $\Omega(h)$ . En combinant ces deux estimations et le Lemme 1.2.10, on obtient

$$\|F(z, h)\| \leq Ch^{-M_1} \text{ sur } \tilde{\Omega}(h),$$

avec  $\tilde{\Omega}(h) = \{z \in \mathbb{C}; |\text{Re } z - \text{Re } z_0| < h^{M_1}, -2h^{M_1} < \text{Im } z < h^{M_1}\}$ . En particulier,  $(2h)^{-M_1} \|\Pi_\theta\| \leq \frac{1}{|z_0 - \bar{z}_0|} \|\Pi_\theta\| = \|F(z_0, h)\| \leq Ch^{-M_1}$  ce qui achève la preuve. □

### Estimations en dimension 1

Supposons que  $V$  est un potentiel de courte portée, holomorphe dans le domaine  $\{z \in \mathbb{C}, |\text{Im } z| < c(\text{Re } z)\}$ . Supposons en outre, qu'il existe  $x_c \in \mathbb{R}$  tel que  $V$  a un maximum non dégénéré  $V(x_c) = E_0$ . Pour  $\delta > 0$ , notons  $\Omega_{E_0, \delta} = D(E_0, \delta)$ . Il suit des travaux de Fujié-Ramond [FR98] que pour tout  $\epsilon > 0$ , les résonance de  $P(h)$  dans  $\Omega_{E_0, \epsilon\theta}$  sont de la forme

$$z_j = E_0 + \frac{S_0 - (2j + 1)\pi h + ih \ln(2)}{K \ln(h)} + \mathcal{O}(h/\ln(h)^2), \quad (1.2.49)$$

où  $j \in \mathbb{Z}$  et  $S_0, K$  sont des constantes fixes. Pour  $j \in \mathbb{Z}$ , on note  $\Pi_{\theta, j}$  le projecteur associé à la résonance  $z_j$ .

**Proposition 1.2.12** *Soit  $j \in \mathbb{Z}$ . Il existe  $h_0 > 0$  et  $N_0 > 0$  tels que pour tout  $N \geq N_0$ , il existe  $M > 0$  tel que*

$$\forall h \in ]0, h_0], \Pi_{\theta, j} = \mathcal{O}(h^{-M}), \quad (1.2.50)$$

avec  $\theta = Nh$ .

*Preuve.* En utilisant la forme explicite des résonances, la preuve se ramène à montrer le lemme général suivant :

**Lemme 1.2.13** *Supposons que  $P(h)$  est un opérateur différentiel sur  $\mathbb{R}$  vérifiant les hypothèses (1.2.4) à (1.2.8). Supposons que les points critiques de  $p_0(x, \xi)$  sur la surface d'énergie  $E_0$  sont non-dégénérés. Alors, il existe  $N_0 > 0$ ,  $h_0 > 0$  et  $\epsilon_0 > 0$  tels que pour tout  $N \geq N_0$ ,  $\epsilon \in ]0, \epsilon_0]$ , il existe  $M > 0$ , tel que pour  $E \in [E_0 - \epsilon, E_0 + \epsilon]$  et pour  $\theta = Nh$  on a*

$$\forall h \in ]0, h_0], \|(P_\theta - z)^{-1}\| = \mathcal{O}(h^{-M}) \prod_{z_j \in \text{Res}(P) \cap \Omega_{E, \epsilon\theta}} \frac{\theta}{|z - z_j|}, \quad (1.2.51)$$

où  $z \in \Omega_{E, \epsilon\theta/2}$  avec  $\Omega_{E, \delta} = E + D(0, \delta)$ .

*Preuve du Lemme :* Il s'agit d'une adaptation du Lemme 1 de Tang et Zworski [TZ98] au cas de domaines de taille variable avec  $h$ . On dilate ici d'un angle  $\theta = Nh$  avec  $N \gg 1$ . En utilisant les travaux de Bony [Bon01, Bon02], on construit un opérateur  $K$  tel que

$$\begin{aligned} n &:= \text{rang}(K) = O(\ln(1/\theta)) \\ \|K\| &= O(1) \\ \|(P_\theta - \theta K - z)^{-1}\| &= O(1/\theta) \end{aligned} \quad (1.2.52)$$

pour tout  $z$  tel que  $|\text{Re}(z) - E| < \epsilon$  et  $\text{Im}(z) \geq -\epsilon\theta$ , avec  $\epsilon > 0$  petit. En posant un problème de Grushin convenable et en utilisant le fait que  $n = O(\ln(1/h))$ , on montre alors que

$$\|(P_\theta - z)^{-1}\| = O(h^{-M}) |\det(E_{-+}(z))|^{-1} \quad (1.2.53)$$

où  $E_{-+}(z)$  est une matrice  $n \times n$  telle que les zéros de  $\det(E_{-+}(z))$  sont exactement les résonances de  $P(h)$ . On conclut alors en suivant les arguments de Sjöstrand [Sjö97].  $\square$

On conclut cette section en remarquant que les estimations du Lemme 1.2.13 ont de nombreuses applications. Par exemple, elles ont été utilisées par Bony et Häffner [BH08] dans l'étude du propagateur pour l'équation des ondes en métrique de DeSitter-Schwartzchild. De telles estimations ont récemment été généralisées au cas de résonances engendrées par un maximum du potentiel en dimension quelconque par Bony-Fujiié, Ramond et Zerzeri (c.f. [BFRZ], Théorème 3.1).

### 1.3 Equation de Schrödinger avec champ magnétique

Nous décrivons ici les résultats obtenus dans [Mic05a] et [Mic05c] sur l'équation de Schrödinger avec champ magnétique constant (voir aussi [Mic05b] pour une présentation synthétique).

Considérons l'équation de Schrödinger avec champ magnétique constant en dimension  $n \geq 3$  :

$$i\partial_t \psi = H(b)\psi,$$

où  $H(b) = H_0(b) + b^\gamma V$  avec  $V \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ ,  $\gamma \in \{0, 1\}$  et

$$H_0 = \left( i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{b}{2} y \right)^2 + \left( i \frac{\partial}{\partial y} - \frac{b}{2} x \right)^2 - \Delta_z.$$

Ici,  $x \in \mathbb{R}$ ,  $y \in \mathbb{R}$ ,  $z \in \mathbb{R}^{n-2}$  et  $\Delta_z$  est le l'opérateur de Laplace sur  $\mathbb{R}_z^{n-2}$ . On supposera que Une partie des résultats présentés a été démontrée dans le cas plus général d'un champ magnétique

de rang  $2d$  avec  $d \geq 1$  (c.f. [Mic05a]), mais afin d'alléger l'exposé des résultats, on suppose ici  $d = 1$ . Dans toute la suite, on notera  $X = (x, y, z) = (x', z) \in \mathbb{R}^n$  avec  $x' = (x, y) \in \mathbb{R}^2$ . Si le potentiel  $V$  satisfait des hypothèses convenables, il est bien connu (c.f. [AHS78]) que l'opérateur de Scattering  $\mathbf{S} = \mathbf{S}(b) : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n)$  associé à la paire  $(H_0, H)$  est bien défini. On cherche ici à décrire le comportement de  $\mathbf{S}(b)$  lorsque le paramètre  $b$  tend vers l'infini. Selon la valeur de  $\gamma = 0$  ou  $1$ , le régime considéré sera du type "hautes énergies" ou du type semiclassique. Dans tous les cas, la première étape dans l'analyse de  $S(b)$ , consiste à définir une notion d'amplitude de diffusion et à en donner une formule en fonction de la résolvante (dans l'esprit de 1.2.1). Pour  $\alpha \in \mathbb{R}$ , on note

$$L_{\alpha, mg}^{\infty} = \{v : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \langle z \rangle^{\alpha} v \in L^{\infty}(\mathbb{R}^n)\} \quad (1.3.1)$$

et

$$L_{\alpha, mg}^2 = \{v : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}, \langle z \rangle^{\alpha} v \in L^2(\mathbb{R}^n)\} \quad (1.3.2)$$

On notera  $\|u\|_{L_{\alpha, mg}^{\infty}} = \|\langle z \rangle^{\alpha} u\|_{L^{\infty}(\mathbb{R}^n)}$  et  $\|u\|_{L_{\alpha, mg}^2} = \|\langle z \rangle^{\alpha} u\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}$  les normes naturelles sur ces espaces. Dans toute la suite, on supposera que  $V$  satisfait l'hypothèse suivante :

**Hypothèse 1** *Il existe  $\alpha > 1$ ,  $V^{\infty} \in L_{\alpha, mg}^{\infty}(\mathbb{R}^{n-2})$  et  $W \in L_{\alpha, mg}^{\infty}(\mathbb{R}^n)$  tels que*

$$\begin{aligned} V(x, y, z) &= V^{\infty}(z) + W(x, y, z) \\ V^{\infty} &\geq 0 \\ \limsup_{|X| \rightarrow \infty} W(X) &= 0. \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

Sous cette hypothèse, l'opérateur de multiplication par  $V$  est  $H_0$ -borné de borne relative égale à 0. Par suite,  $H$  est autoadjoint avec domaine  $D(H_0) = \{u \in L^2, H_0 u \in L^2\}$  (c.f. [RD01], [AHS78]). De plus l'opérateur de diffusion associé à la paire  $(H_0, H_0 + V)$  est bien défini (c.f. Théorème 4.1 de [AHS78]) et la matrice de diffusion peut être définie via la représentation spectrale de  $H_0$ . Plus précisément, notons

$$\widehat{H}_0 = \left( i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{b}{2} y \right)^2 + \left( i \frac{\partial}{\partial y} - \frac{b}{2} x \right)^2 \quad (1.3.4)$$

l'opérateur de Schrödinger avec champ magnétique constant sur  $L^2(\mathbb{R}^2)$ . Il est bien connu que le spectre de  $\widehat{H}_0$  est purement ponctuel (c.f. [AHS78], [RD01]) et donné par la suite des niveaux de Landau  $\mathbb{L} = \sigma(\widehat{H}_0) = \sigma_{pp}(\widehat{H}_0) = \{b\Lambda_q, q \in \mathbb{N}^*\}$ , où  $\Lambda_q = 2q - 1, \forall q \in \mathbb{N}^*$ . On note  $\widetilde{\Pi}_q : L^2(\mathbb{R}^2) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^2)$  le projecteur sur le sous espace propre associé à  $b\Lambda_q$ , et l'on définit

$$L_{\alpha}^2(\mathbb{R}_z^{n-2}) = \{f \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}_z^{n-2}); \langle z \rangle^{\alpha} f \in L^2(\mathbb{R}_z^{n-2})\}$$

où  $\langle z \rangle = (1 + |z|^2)^{1/2}$ . On note  $\mathcal{H}$  l'espace défini par  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^2$  si  $n = 3$  et  $\mathcal{H} = L^2(S^{n-3})$  si  $n \geq 4$ . Pour  $E > 0$ , on introduit l'application  $\widetilde{\mathcal{F}}_0(E) : L_{\alpha}^2(\mathbb{R}_z^{n-2}) \rightarrow \mathcal{H}$  définie par

$$\widetilde{\mathcal{F}}_0(E)\varphi = \frac{E^{-1/4}}{\sqrt{4\pi}} \left( \int_{\mathbb{R}} e^{-i\sqrt{E}z} \varphi(z) dz, \int_{\mathbb{R}} e^{i\sqrt{E}z} \varphi(z) dz \right)$$

si  $n = 3$  et

$$\widetilde{\mathcal{F}}_0(E)\varphi(\xi) = \frac{E^{\frac{n-4}{4}}}{\sqrt{2}(2\pi)^{\frac{n-2}{2}}} \int_{\mathbb{R}^{n-2}} e^{-i\sqrt{E}\langle z, \xi \rangle} \varphi(z) dz,$$

si  $n \geq 4$ . Pour  $E > b\Lambda_1 = b$ , on introduit

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_0(E) : L^2(\mathbb{R}_{x,y}^2, L_\alpha^2(\mathbb{R}_z^{n-2})) &\rightarrow L^2(\mathbb{R}_{x,y}^2, \mathcal{H}) \\ \varphi &\mapsto \sum_{b\Lambda_q \leq E} \tilde{\Pi}_q \otimes \tilde{\mathcal{F}}_0(E - b\Lambda_q)\varphi \end{aligned}$$

et en toute dimension, on définit

$$\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}^n) \rightarrow L^2(]b, +\infty[, L^2(\mathbb{R}^2, \mathcal{H}), dE)$$

par  $\mathcal{F}\varphi(E) = \mathcal{F}_0(E)\varphi$ . Pour  $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^n)$ ,  $\mathcal{F}_0(E)\varphi$  a un sens en tant que fonction  $L^2$  de la variable  $E$ . L'opérateur  $\mathcal{F}$  est un isomorphisme unitaire et

- $\mathcal{F}H_0\mathcal{F}^*$  est l'opérateur de multiplication par  $E$  sur  $L^2(]b, +\infty[, L^2(\mathbb{R}^2, \mathcal{H}), dE)$
- pour tout  $t > 0$ ,  $\mathcal{F}S(b)\mathcal{F}^*$  et  $e^{it\mathcal{F}H_0\mathcal{F}^*}$  commutent.

En invoquant à nouveau le Théorème XIII.84 de [RS78], on montre qu'il existe une fonction  $E \mapsto S(E, b)$  appartenant à  $L^\infty(]b, +\infty[, \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^2), \mathcal{H}))$  telle que

$$\forall \varphi \in L^2(\mathbb{R}^n), (\mathcal{F}S(b)\varphi)(E) = S(E, b)(\mathcal{F}\varphi)(E).$$

Pour  $E > 0$ ,  $S(E, b)$  est appelée matrice de diffusion. Dans le cas  $n = 3$  c'est effectivement une matrice dont les coefficients sont des opérateurs bornés sur  $L^2(\mathbb{R}^2)$ . Si  $n \geq 4$ , c'est un opérateur sur  $L^2(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{S}^{n-3})$ .

Nous aimerions conclure cette section en soulignant qu'il y existe très peu de travaux sur l'amplitude de diffusion en présence de champ magnétique fort. Dans le cas où le potentiel magnétique  $A(x)$  est de longue portée, il existe des travaux de Nicoleau décrivant l'amplitude de diffusion à haute énergie [Nic97].

Dans le cas d'un champ magnétique constant, les seuls travaux sont à notre connaissance ceux de Kostykin-Kvitsinsky-Merkuriev [KKM95]. Dans cet article les auteurs étudient des amplitudes de diffusion partielles près des niveaux de Landau ( $b$  étant fixé) sous des hypothèses de symétrie sur le potentiel  $V$ .

Enfin, nous aimerions mentionner les travaux récents travaux de Bony, Bruneau, Dimassi, Petkov, Puschnitky, Raikov (c.f. [BBR07], [BPR04], [BR04] [BD07]) autour de la fonction de décalage spectral et de la théorie des résonances.

### 1.3.1 Principe d'absorption limite et représentation de la matrice de diffusion

Le premier résultat démontré dans [Mic05a] donne une formule explicite de la matrice de diffusion en terme de fonctions propres généralisées. Etant donnés deux espaces de Banach  $B_1, B_2$ , on notera  $\mathcal{L}(B_1, B_2)$  l'espace des opérateurs linéaires bornés de  $B_1$  dans  $B_2$ . Lorsque  $B_1 = B_2$  on note simplement  $\mathcal{L}(B_1)$ .

**Théorème 1.3.1** *Supposons que l'hypothèse 1 est satisfaite et notons  $\sigma_{pp}(H)$  le spectre ponctuel de  $H$ . Alors, pour tout  $E \in ]b\Lambda_1, +\infty[ \setminus (\mathbb{L} \cup \sigma_{pp}(H))$ , on a*

$$S(E, b) - Id = -2i\pi b^\gamma \mathcal{F}_0(E)V(X)\mathcal{F}_0(E)^* + 2i\pi b^{2\gamma} \mathcal{F}_0(E)V(X)R(E + i0)V(X)\mathcal{F}_0(E)^*, \quad (1.3.5)$$

où la limite

$$R(E + i0) = \lim_{\mu \rightarrow 0^+} (H - E - i\mu)^{-1}$$

existe dans l'espace  $\mathcal{L}(L_{\alpha, mg}^2(\mathbb{R}^n), L_{-\alpha, mg}^2(\mathbb{R}^n))$  pour  $\alpha > 1/2$ .

**Remarque 1.3.2** *Supposons qu'il existe  $R > 0$  tel que pour tout  $z \in \mathbb{R}^{n-2}$  vérifiant  $|z| \geq R$  on ait  $V(\cdot, z) = 0$ . Soient  $\chi_1, \chi_2 \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{n-2})$  égale à 1 sur  $B(0, R)$  et telles que  $\chi_1 = 1$  sur le support de  $\chi_2$ . En faisant quelques intégrations par parties, on déduit facilement du théorème 1.3.1, la formule de représentation suivante :*

$$S(E, b) = -2i\pi \mathcal{F}_0(E) [\Delta_z, \chi_1] R(E + i0) [\Delta_z, \chi_2] \mathcal{F}_0(E)^* \quad (1.3.6)$$

A partir de ces formules, un calcul direct permet d'obtenir le résultat suivant :

**Corollaire 1.3.3** *Pour  $E \in ]b\Lambda_1, +\infty[ \setminus (\mathbb{L} \cup \sigma_{pp}(H))$ ,  $T(E, b) := S(E, b) - Id$  possède un noyau*

$$(\omega, \omega') \in S^{n-3} \times S^{n-3} \rightarrow T(\omega, \omega', E, b) \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^2))$$

*qui est régulier sur  $S^{n-3} \times S^{n-3}$ . On appellera ce noyau amplitude de diffusion de la paire  $(H_0, H)$ .*

Donnons rapidement les idées de la preuve du Théorème 1.3.1. Ici, le paramètre  $b$  est fixé. On le supposera donc égal à 1 afin d'alléger les notations. Notons  $\frac{\partial \tilde{E}_0}{\partial \lambda} : L^2(\mathbb{R}^{n-2}) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^{n-2})$  la résolution spectrale du Laplacien  $-\Delta_z$  sur  $\mathbb{R}^{n-2}$ . Alors la résolution spectrale de  $H_0$  est donnée par

$$\frac{\partial E_0}{\partial \lambda} = \sum_{\Lambda_q \leq \lambda} \tilde{\Pi}_q \otimes \frac{\partial \tilde{E}_0}{\partial \lambda} (\lambda - \Lambda_q) \quad (1.3.7)$$

Par ailleurs, il est bien connu que  $\frac{\partial \tilde{E}_0}{\partial \lambda} = \tilde{\mathcal{F}}_0(\lambda)^* \tilde{\mathcal{F}}_0(\lambda)$ , de sorte que

$$\frac{\partial E_0}{\partial \lambda} = \mathcal{F}_0(\lambda)^* \mathcal{F}_0(\lambda) \quad (1.3.8)$$

Pour  $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ , on note  $R_0(\lambda) = (H_0 - \lambda)^{-1}$  et  $R(\lambda) = (H - \lambda)^{-1}$ . On note  $\sigma_{pp}(H)$  le spectre ponctuel de  $H$ . Le point clef de la preuve est l'obtention d'un principe d'absorption limite (on introduit à nouveau le paramètre  $b$  afin de disposer d'un énoncé utilisable par la suite) :

**Proposition 1.3.4** *Les assertions suivantes sont vraies :*

*i) Supposons que  $\lambda \in ]b\Lambda_1, +\infty[ \setminus \mathbb{L}$  et soit  $\alpha > 1/2$ , alors la limite suivante existe dans l'espace des opérateurs bornés  $\mathcal{L}(L_{\alpha, mg}^2(\mathbb{R}^n), L_{-\alpha, mg}^2(\mathbb{R}^n))$*

$$R_0(\lambda \pm i0) = \lim_{\mu \rightarrow 0^+} R_0(\lambda \pm i\mu) \quad (1.3.9)$$

*ii) Supposons que l'hypothèse 1 est vérifiée et que  $\lambda \in ]b\Lambda_1, +\infty[ \setminus (\mathbb{L} \cup (\sigma_{pp}(H)))$ , alors la limite suivante existe dans l'espace  $\mathcal{L}(L_{\alpha, mg}^2(\mathbb{R}^n), L_{-\alpha, mg}^2(\mathbb{R}^n))$  pour tout  $\alpha > 1/2$*

$$R(\lambda \pm i0) = \lim_{\mu \rightarrow 0^+} R(\lambda \pm i\mu) \quad (1.3.10)$$

*Preuve de la proposition* On prend  $b = 1$ . La preuve de i) est une conséquence directe de propriétés similaires pour le Laplacien libre. Afin de démontrer ii), on introduit pour  $\lambda, \mu \in \mathbb{R}$ ,  $\mu > 0$  la résolvante

$$R_\infty(\lambda \pm i\mu) = (H_0 + V^\infty - (\lambda \pm i\mu))^{-1}.$$

Comme  $V^\infty$  commute avec les projecteurs  $\tilde{\Pi}_q$ , on a

$$\begin{aligned} R_\infty(\lambda \pm i\mu) &= \sum_{q \in \mathbb{N}^*} \tilde{\Pi}_q \otimes (-\Delta_z + V^\infty - (\lambda \pm i\mu - b\Lambda_q))^{-1} \\ &= \sum_{\Lambda_q \leq \lambda} \tilde{\Pi}_q \otimes (-\Delta_z + V^\infty - (\lambda \pm i\mu - b\Lambda_q))^{-1} + W(\lambda \pm i\mu). \end{aligned} \quad (1.3.11)$$



Comme  $V^\infty \geq 0$ , on a  $\|W(\lambda \pm i\mu) - W(\lambda \pm i\mu')\|_{L^2 \rightarrow L^2} \leq C|\mu - \mu'|$ . Par ailleurs, comme  $V^\infty$  est positif et de courte portée, alors  $\sigma_{pp}(-\Delta_z + V^\infty) = \emptyset$  et l'on déduit du principe d'absorption limite pour le Laplacien que

$$R_\infty(\lambda \pm i0) = \lim_{\mu \rightarrow 0^+} R_\infty(\lambda \pm i\mu) \quad (1.3.12)$$

existe dans  $\mathcal{L}(L_{\alpha,mg}^2(\mathbb{R}^n), (L_{-\alpha,mg}^2(\mathbb{R}^n)))$  pour tout  $\alpha > 1/2$ .

Pour  $\text{Im } \lambda > 0$  on écrit ensuite  $R(\lambda) = R_\infty(\lambda)(Id + WR_\infty(\lambda))^{-1}$ . D'après le Théorème de Fredholm analytique, il suffit de montrer que pour tout  $\text{Im } \lambda \geq 0, \lambda \notin \mathbb{L}$ , l'opérateur  $K(\lambda) = WR_\infty(\lambda)$  est compact de  $L_{\alpha,mg}^2(\mathbb{R}^n)$  dans  $L_{-\alpha,mg}^2(\mathbb{R}^n)$  pour un certain  $\alpha > 1/2$ .

On écrit,  $K(\lambda) = WR_0(\lambda)(Id + V^\infty R_0(\lambda))^{-1}$ . Or, le principe d'absorption limite pour  $R^\infty$  montre que  $(Id + V^\infty R_0(\lambda))^{-1}$  peut être prolongé à  $\{\text{Im } \lambda > 0\} \cup (]\Lambda_1, \infty[ \setminus \mathbb{L})$  en un opérateur borné de  $L_{\alpha,mg}^2(\mathbb{R}^n)$  dans  $L_{-\alpha,mg}^2(\mathbb{R}^n)$ , pourvu que  $\alpha$  soit proche de  $1/2$ . Par suite, il reste juste à montrer que l'opérateur  $WR_0(\lambda)$  est compact de  $L_{\alpha,mg}^2(\mathbb{R}^n)$  dans  $L_{-\alpha,mg}^2(\mathbb{R}^n)$ . Ceci découle directement de l'inégalité diamagnétique (c.f. [AHS78]) et des injections de Sobolev.  $\square$   
Revenons maintenant à la preuve du Théorème.

Une fois établi le principe d'absorption limite, la formule (1.3.5) s'obtient de façon quasi automatique. On rappelle brièvement les grandes lignes de la preuve. En utilisant à nouveau la théorie spectrale du Laplacien libre, on montre que pour tout  $\lambda \in ]b\Lambda_1, \infty[ \setminus \mathbb{L}$ , on a

$$R_0(\lambda + i0) - R_0(\lambda - i0) = 2i\pi \mathcal{F}_0(\lambda)^* \mathcal{F}_0(\lambda) \quad (1.3.13)$$

Par ailleurs, si l'on note  $W_\pm$  les opérateurs d'onde pour la paire  $(H_0, H)$  et  $\mathbf{S}$  la matrice de diffusion, on a

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{S} - Id)f, g \rangle &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \langle e^{itH} V e^{-itH_0} f, W_+ g \rangle dt \\ W_+ - Id &= i \int_0^{+\infty} e^{i\sigma H} V e^{-i\sigma H_0} d\sigma \end{aligned} \quad (1.3.14)$$

En combinant ces expressions avec l'identité  $e^{i\sigma H_0} = \int_{\Lambda_1}^{\infty} e^{i\lambda\sigma} \mathcal{F}_0(\lambda)^* \mathcal{F}_0(\lambda) d\lambda$  et en travaillant comme dans [IK85], on obtient le résultat annoncé.

Nous allons maintenant étudier le comportement de la matrice de diffusion lorsque  $b$  tend vers l'infini. Dans un premier temps on s'intéressera au cas où le champ magnétique domine le potentiel électrique et on supposera  $\gamma = 0$ . On considérera ensuite le cas  $\gamma = 1$ , qui décrit la situation d'un champ magnétique et d'un potentiel électrique de même intensité.

### 1.3.2 Asymptotiques lorsque le champ magnétique domine le potentiel électrique

Dans toute cette section, on suppose que  $\gamma = 0$ . Pour  $V \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^n)$ , on notera  $\hat{V}^z$  la transformée de Fourier partielle dans la variable  $z \in \mathbb{R}^{n-2}$  de  $V$ . On introduit deux nouvelles hypothèses sur le potentiel  $V$ .

**Hypothèse 2** *On suppose que le potentiel  $V \in L_{\rho,mg}^\infty(\mathbb{R}^n)$  pour un certain  $\rho > n - 2$  et  $\hat{V}^z \in L_{r,mg}^\infty(\mathbb{R}^n)$  pour un certain  $r > 0$ .*

**Hypothèse 3** *On suppose que  $\hat{V}^z \in C^1(\mathbb{R}^n)$  et que  $\sup_{X \in \mathbb{R}^n} |\nabla_X \hat{V}^z(X)| < \infty$ .*

Dans la suite, on notera  $\tilde{\mathbb{L}} = b^{-1}\mathbb{L} = 2\mathbb{N} + 1$ .

**Théorème 1.3.5** *Supposons que les hypothèses 1 et 2 sont satisfaites.*

i) Soit  $q_1 \in \mathbb{N}^*$  et  $\lambda = \lambda(b) \in ]b\Lambda_{q_1}, b\Lambda_{q_1+1}[$ . On note  $\delta = \text{dist}(\lambda, \mathbb{L})$ ,  $E_q = E_q(\lambda, b) = (\lambda - b\Lambda_q)^{\frac{1}{2}}$  et on suppose que  $\delta > \|V\|_{L_{\rho, m_g}^\infty}$ . Alors, il existe  $C > 0$  tel que

$$\begin{aligned} \sup_{\omega, \omega' \in \mathbb{S}^{n-3}} \|T(\omega, \omega', \lambda, b) + \frac{i}{2(2\pi)^{n-1}} \sum_{q=1}^{q_1} E_q^{n-4} \tilde{\Pi}_q \hat{V}^z(x, y, E_q(\omega - \omega')) \tilde{\Pi}_q\|_{L^2 \rightarrow L^2} \\ \leq C \delta^{\frac{n-4-\min(1,r)}{2}} \end{aligned} \quad (1.3.15)$$

ii) On suppose en plus que l'hypothèse 3 est vérifiée. Soit  $\mathcal{E} \in ]\Lambda_1, \infty[ \setminus \tilde{\mathbb{L}}$  et  $\Delta \subset \mathbb{R}$  un intervalle borné. Alors, il existe  $C > 0$  tel que pour  $b$  assez grand on ait

$$\begin{aligned} \sup_{\omega, \omega' \in \mathbb{S}^{n-3}, \lambda \in \Delta} \|T(\omega, \omega', \mathcal{E}b + \lambda, b) + \frac{i b^{(n-4)/2}}{2(2\pi)^{n-1}} \sum_{\Lambda_q \leq \mathcal{E}} \beta_q^{n-4} \hat{V}^z(x, y, \beta_q(\omega - \omega')) \tilde{\Pi}_q\|_{L^2 \rightarrow L^2} \\ \leq C b^{\frac{n-4-\min(1,r)}{2}} \end{aligned} \quad (1.3.16)$$

avec  $\beta_q = (\mathcal{E} - \Lambda_q)^{\frac{1}{2}}$ .

On peut aussi utiliser la formule de représentation du Théorème 1.3.1 pour étudier la phase de diffusion  $s(\lambda, b)$  associée à la paire  $(H_0, H)$ . Rappelons brièvement sa construction. Supposons que l'opérateur  $T(\lambda, b) = S(\lambda, b) - Id$  est de classe trace. Alors, le déterminant  $\det(I + T(\lambda, b))$  est bien défini. De plus,  $S(\lambda, b)$  étant unitaire, c'est un nombre complexe de module 1. La phase de diffusion  $s(\lambda, b)$  est le nombre réel défini modulo 1 par

$$\det(S(\lambda, b)) = e^{-2i\pi s(\lambda, b)} \quad (1.3.17)$$

Supposons maintenant que pour  $b$  assez grand, on a  $\|T(\lambda, b)\| \leq c < 1$  uniformément par rapport à  $\lambda$ . Alors, la phase de diffusion peut être définie de façon unique par le procédé suivant. Considérons la fonction  $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{C}$  définie par

$$f(\sigma) = \det(Id + \sigma T(\lambda, b)), \quad \forall \sigma \in [0, 1] \quad (1.3.18)$$

Comme  $\|T\| < 1$ , alors  $Id + \sigma T$  est inversible et la fonction  $f$  ne s'annule pas. Par suite, la fonction  $\ln(f)$  telle que  $\ln(f)(0) = 0$  est uniquement déterminée, de sorte que  $s(\lambda, b) = \ln(f(1))$  est bien définie. De plus, par construction, on a :

$$2i\pi s(\lambda, b) = \int_0^1 \frac{d}{d\sigma} \ln(\det(Id + \sigma T(\lambda, b))) d\sigma = \int_0^1 \text{tr}(T(\lambda, b)(Id + \sigma T(\lambda, b))^{-1}) d\sigma. \quad (1.3.19)$$

Cette formule nous servira dans l'étude asymptotique  $b \rightarrow \infty$  de la phase de diffusion. Avant d'énoncer notre résultat, rappelons le lien entre la phase de diffusion et la fonction de décalage spectral  $\xi(\lambda, b)$ . Supposons que la différence  $(H + \lambda_0)^{-\gamma} - (H_0 + \lambda_0)^{-\gamma}$  est de classe trace pour des  $\lambda_0, \gamma_0 > 0$  assez grands. Alors, la fonction de décalage spectral peut être définie comme l'unique distribution (en  $\lambda$ ) telle que

$$\langle \xi'(\cdot, b), f \rangle_{\mathcal{D}', \mathcal{D}} = \text{tr}(f(H) - f(H_0)) \quad (1.3.20)$$

et  $\xi(\lambda, b) = 0$  sous le spectre essentiel de  $H$ . De plus, on sait d'après la théorie de Birman-Krein que  $\det(S(\lambda, b)) = e^{-2i\pi\xi(\lambda, b)}$  de sorte qu'il existe une fonction  $c(\lambda, b)$  à valeurs dans  $\mathbb{Z}$  telle que  $\xi = s + c$ . Dans [BPR04], Bruneau, Pushnitsky et Raikov ont étudié le comportement asymptotique de la fonction de décalage spectral. Le théorème suivant généralise leurs résultats. De plus, la méthode employée est complètement différente puisque nous passons par la matrice de diffusion.

**Théorème 1.3.6** *Supposons que l'hypothèse 1 est satisfaite et que  $V \in L^1(\mathbb{R}^n)$ . Soient  $\mathcal{E} \in ]\Lambda_1, \infty[ \setminus \tilde{\mathbb{L}}$  et  $\Delta$  un intervalle borné de  $\mathbb{R}$ . Pour  $b$  assez grand, on a  $\sup_{\lambda \in \Delta} \|T(\mathcal{E}b + \lambda)\| \leq Cb^{-\frac{1}{2}}$  et*

$$\sup_{\lambda \in \Delta} |s(\mathcal{E}b + \lambda, b) + b^{\frac{n-2}{2}} \frac{mes(\mathbb{S}^{n-3})}{2(2\pi)^{n-1}} \sum_{\Lambda_q \leq \mathcal{E}} \beta_q^{n-3} \int_{\mathbb{R}^n} V(x) dx| = O(b^{\frac{n-3}{2}}). \quad (1.3.21)$$

Si l'on fait des hypothèses supplémentaires sur le potentiel  $V$ , on peut montrer que la phase de diffusion possède un développement asymptotique complet. Dans le théorème suivant, on se limite au cas de la dimension  $n = 3$  et l'on suppose que le potentiel  $V$  est à décroissance rapide ainsi que ses dérivées.

**Théorème 1.3.7** *Supposons que  $V \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^3)$ . Soit  $\mathcal{E} \in ]\Lambda_1, \infty[ \setminus \tilde{\mathbb{L}}$  et  $\Delta$  un intervalle borné de  $\mathbb{R}$ . Il existe une suite de coefficients  $(a_j(\lambda, \mathcal{E}, b))_{j \in \mathbb{N}}$  telle que pour  $b$  assez grand, on ait :*

$$\sup_{\lambda \in \Delta} |s(\mathcal{E}b + \lambda, b) - b^{\frac{1}{2}} \sum_{j=0}^{\infty} a_j(\lambda, \mathcal{E}, b) b^{-j}| = O(b^{-\infty}). \quad (1.3.22)$$

De plus, les coefficients  $a_j$  peuvent être calculés. Si l'on pose  $\gamma_j(\mathcal{E}) = \sum_{\Lambda_q \leq \mathcal{E}} (\mathcal{E} - \Lambda_q)^{-\frac{1}{2}-j}$ , on a :

$$\begin{aligned} a_0(\lambda, \mathcal{E}, b) &= -\frac{\gamma_0(\mathcal{E})}{4\pi^2} \int_{\mathbb{R}^3} V(x) dx, \\ a_1(\lambda, \mathcal{E}, b) &= \frac{\gamma_1(\mathcal{E})}{16\pi^2} \left( 2\lambda \int_{\mathbb{R}^3} V(x) dx - \int_{\mathbb{R}^3} V(x)^2 dx \right) \end{aligned} \quad (1.3.23)$$

### Estimation de la résolvante

Le point clef des démonstrations des théorèmes précédents est l'estimation des résolvantes  $R_0$  et  $R$ .

**Proposition 1.3.8** *Soit  $\alpha > \frac{1}{2}$ . Il existe des constantes  $C_0, C_1 > 0$  telles que l'on ait les assertions suivantes :*

i) *Supposons que  $\lambda \in ]b\Lambda_1, \infty[ \setminus \mathbb{L}$ , alors*

$$\|R_0(\lambda \pm i0)\|_{L_{\alpha, mg}^2 \rightarrow L_{-\alpha, mg}^2} \leq \frac{C_0}{\text{dist}(\lambda, \mathbb{L})^{1/2}} \quad (1.3.24)$$

ii) *Supposons que l'hypothèse 1 est vérifiée et que  $\alpha \in ]\frac{1}{2}, \frac{p}{2}]$ . Soient  $\lambda \in ]b\Lambda_1, \infty[ \setminus \mathbb{L}$  tel que  $\text{dist}(\lambda, \mathbb{L}) > C_0 \|V\|_{L_{2\alpha, mg}^\infty}$ , alors  $\lambda \notin \sigma_{pp}(\mathbb{H})$  et*

$$\|R(\lambda \pm i0)\|_{L_{\alpha, mg}^2 \rightarrow L_{-\alpha, mg}^2} \leq \frac{C_1}{\text{dist}(\lambda, \mathbb{L})^{1/2}} \quad (1.3.25)$$

*Preuve.* Le point i) est une conséquence immédiate des estimations haute énergie bien connues pour le Laplacien. Pour le point ii), il suffit d'écrire

$$R(\lambda \pm i0) = R_0(\lambda \pm i0)(Id + VR_0(\lambda \pm i0))^{-1} \quad (1.3.26)$$

et d'utiliser l'estimation de  $R_0$  pour montrer que  $Id + VR_0(\lambda \pm i0)$  est inversible sur  $L_{\alpha, mg}^2$   $\square$

### Preuve du Théorème 1.3.5

Soient  $q_1 \in \mathbb{N}^*$  et  $\lambda \in ]b\Lambda_{q_1}, b\Lambda_{q_1+1}[$ . En combinant le Théorème 1.3.1 et l'hypothèse 2, pour  $b$  assez grand on peut écrire l'amplitude de diffusion  $T(\omega, \omega', \lambda, b)$  sous la forme  $T = T_1 + T_2$  avec

$$T_1(\omega, \omega', \lambda, b) = -\frac{i\pi}{(2\pi)^{n-2}} \sum_{p,q=1}^{q_1} (E_q E_p)^{(n-4)/2} \tilde{\Pi}_p \left( \int_{\mathbb{R}^{n-2}} V(x', z) e^{iE_q \langle z, \omega' \rangle - iE_p \langle z, \omega \rangle} dz \right) \tilde{\Pi}_q \quad (1.3.27)$$

et

$$T_2(\omega, \omega', \lambda, b) = -\frac{i\pi}{(2\pi)^{n-2}} \sum_{p,q=1}^{q_1} (E_q E_p)^{(n-4)/2} \tilde{\Pi}_p \left( \int_{\mathbb{R}^{n-2}} V(x', z) e^{iE_q \langle z, \omega' \rangle} \overline{u_\omega(x', z)} dz \right) \tilde{\Pi}_q \quad (1.3.28)$$

où la fonction  $u_\omega$  est donnée par  $u_\omega = R(\lambda + i0)(V e^{iE_p \langle \cdot, \omega \rangle})$  et  $E_q = (\lambda - b\Lambda_q)^{\frac{1}{2}}$ . La Proposition 1.3.8 permet de montrer facilement que

$$\|T_2(\omega, \omega', \lambda, b)\|_{L^2(\mathbb{R}^2) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^2)} \leq C\lambda \|V\|_{L_{\rho, mg}^\infty}^2 b^{-1} \delta^{(n-5)/2} \leq C\delta^{(n-5)/2} \quad (1.3.29)$$

Par ailleurs, si  $p \neq q$ , l'hypothèse  $\hat{V}^z \in L_{r, mg}^\infty$  permet de montrer facilement que

$$\int_{\mathbb{R}^{n-2}} V(x', z) e^{iE_q \langle z, \omega' \rangle - iE_p \langle z, \omega \rangle} dz \leq C \|\hat{V}^z\|_{L_{r, mg}^\infty} \delta^{-r/2} \quad (1.3.30)$$

En combinant ces deux estimations on obtient l'asymptotique (1.3.15).

Pour prouver (1.3.16), il suffit de remplacer  $\lambda$  par  $\mathcal{E}b + \lambda$  dans (1.3.15) et d'utiliser l'estimation suivante due à Bruneau-Pusnitski-Raikov (Lemme 9.1 de [BPR04]) :

$$\|(1 - \tilde{\Pi}_q) \hat{V}^z(\cdot, b^{\frac{1}{2}} \beta_q(\omega - \omega')) \tilde{\Pi}_q\|_{L^2(\mathbb{R}^2) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^2)} \leq Cqb^{-1/2} \sup_{X \in \mathbb{R}^n} (|\partial_x \hat{V}^z(X)| + |\partial_y \hat{V}^z(X)|) \quad (1.3.31)$$

### Preuve des Théorèmes 1.3.6 et 1.3.7

On commence par montrer que pour  $\mathcal{E} \notin \tilde{\mathbb{L}}$ , l'opérateur  $T(\mathcal{E}b + \lambda)$  est de classe trace et satisfait des estimations convenables. On note  $\mathcal{S}^1$  l'espace des opérateurs de classe trace sur  $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{S}^{n-3}$  et  $\|\cdot\|_1$  la norme trace correspondante. Comme  $\mathcal{E} \notin \tilde{\mathbb{L}}$ , alors pour tout intervalle borné  $\Delta \subset \mathbb{R}$  pour tout  $\alpha > 1/2$  et pour  $b$  assez grand, on déduit de la Proposition 1.3.8 que

$$\sup_{\lambda \in \Delta} \|R(\mathcal{E}b + \lambda \pm i0)\|_{L_{\alpha, mg}^2, L_{-\alpha, mg}^2} \leq Cb^{-1/2} \quad (1.3.32)$$

En utilisant l'identité (1.3.26), on peut développer la résolvante  $R$  en puissance de  $VR_0$  pour  $b$  grand. En combinant ce développement avec le Théorème 1.3.1, on montre que pour tout  $L \in \mathbb{N}$ ,

$$T(\mathcal{E}b + \lambda b) = \sum_{l=0}^L \sum_{\Lambda_q \leq \mathcal{E}} T_{q,l}(\mathcal{E}b + \lambda b) + O(\|T_{q,L+1}(\mathcal{E}b + \lambda b)\|_1) \quad (1.3.33)$$

avec

$$T_{q,l}(\mathcal{E}b + \lambda b) = (-1)^{l+1} 2i\pi \mathcal{F}_{q,0}(\mathcal{E}b + \lambda b) (V(X)R_0(\mathcal{E}b + \lambda b))^l V(X) \mathcal{F}_{q,0}(\mathcal{E}b + \lambda b)^* \quad (1.3.34)$$

et

$$\mathcal{F}_{q,0}(E) = \tilde{\Pi}_q \otimes \tilde{\mathcal{F}}_0(E - b\Lambda_q), \quad \forall E > b\Lambda_q \quad (1.3.35)$$

En utilisant la Proposition 1.3.8 et la forme explicite du noyau des opérateurs  $\tilde{\Pi}_q$ , on montre le lemme suivant :

**Lemme 1.3.9** *Supposons que  $V$  satisfait l'hypothèse 1. Soit  $\mathcal{E} \in ]\Lambda_1, \infty[ \setminus \tilde{\mathbb{L}}$  et  $\Delta \subset \mathbb{R}$  un intervalle borné. Pour  $b$  assez grand, on a les estimations suivantes :*

i) *Pour tout  $\epsilon > 0$*

$$\sup_{\lambda \in \Delta} \|T_{q,l}(\mathcal{E}b + \lambda b)\|_{L^2(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{S}^3) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{S}^3)} \leq Cb^{-\frac{3}{4} - \frac{l}{2} + \epsilon} \quad (1.3.36)$$

ii) *Supposons en plus que  $V \in L^1(\mathbb{R}^n)$ . Pour  $b$  assez grand,  $T(\mathcal{E}b + \lambda b)$  et  $T_{q,l}(\mathcal{E}b + \lambda b)$  sont de classe trace et*

$$\sup_{\lambda \in \Delta} \|T_{q,l}(\mathcal{E}b + \lambda b)\|_1 \leq Cb^{\frac{n-2-l}{2}}, \quad \sup_{\lambda \in \Delta} \|T(\mathcal{E}b + \lambda b)\|_1 \leq Cb^{\frac{n-2}{2}} \quad (1.3.37)$$

En combinant ce lemme, la formule (1.3.19) et l'orthogonalité des projecteurs  $\tilde{\Pi}_q$ , on obtient

$$2i\pi s(\mathcal{E}b + \lambda b) = \sum_{\Lambda_q \leq \mathcal{E}} \sum_{k=0}^N \frac{(-1)^k}{k+1} \text{tr} \left( \sum_{l=0}^L T_{q,l}(\mathcal{E}b + \lambda b) \right)^{k+1} + O(b^{\frac{n-3-L}{2}} + b^{\frac{n-3-N}{2}}) \quad (1.3.38)$$

La fin de la preuve consiste à calculer directement la trace de produits  $T_{q,l_1} T_{q,l_2} \dots T_{q,l_p}$  à partir d'une formule explicite pour le noyau des opérateurs  $T_{q,l}$ .

### 1.3.3 Asymptotiques lorsque le champ magnétique et le potentiel électrique sont de même ordre de grandeur

Les résultats présentés ici ont été publiés dans [Mic05b]. On s'intéresse au cas où le champ magnétique et le potentiel électrique sont d'intensité comparable. On suppose donc que  $\gamma = 1$  de sorte que l'Hamiltonien  $H(b)$  est donné par  $H(b) = H_0(b) + bV$  avec

$$H_0 = \left( i \frac{\partial}{\partial x} + \frac{b}{2} y \right)^2 + \left( i \frac{\partial}{\partial y} - \frac{b}{2} x \right)^2 - \Delta_z.$$

Dans toute la suite, on supposera que  $V$  peut s'écrire sous la forme

$$V(x, y, z) = V^\infty(z) + W(x, y, w), \quad \forall x, y \in \mathbb{R}, \quad z \in \mathbb{R}^{n-2} \quad (1.3.39)$$

avec  $V^\infty \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{n-2})$ ,  $W \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$  et  $V^\infty, W \geq 0$ .

Sous ces hypothèses, on a vu que l'opérateur de diffusion  $S(E, b)$  est défini pour tout  $E \in ]b\Lambda_1, \infty[ \setminus (\mathbb{L} \cup \sigma_{pp}(H(b)))$ . De plus, d'après le Théorème 1.3.1, pour de telles énergies, on a

$$T(E, b) := S(E, b) - Id = -2i\pi \mathcal{F}_0(E) [\Delta_z, \chi_1] R(E + i0) [\Delta_z, \chi_2] \mathcal{F}_0(E)^* \quad (1.3.40)$$

où  $\chi_1, \chi_2 \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{n-2})$  vérifient  $V \prec \chi_1 \prec \chi_2$ . Dans le cas  $n = 3$  c'est effectivement une matrice dont les coefficients sont des opérateurs bornés sur  $L^2(\mathbb{R}^2)$ . Si  $n \geq 4$ , c'est un opérateur sur  $L^2(\mathbb{R}^2 \times \mathbb{S}^{n-3})$  qui possède un noyau

$$(\omega, \omega') \in S^{n-3} \times S^{n-3} \mapsto T(\omega, \omega', E, b) \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}_{x,y}^2))$$

qui est régulier par rapport à  $(\omega, \omega')$ .

Le but de notre étude est de décrire le comportement de  $T(\omega, \omega', \lambda b, b)$  lorsque  $b \rightarrow \infty$ , le niveau d'énergie  $\lambda$  étant fixé dans  $]\Lambda_1, \infty[ \setminus \tilde{\mathbb{L}}$ . En particulier la distance entre le niveau d'énergie  $\lambda b$  et les niveaux de Landau  $b\Lambda_q$  tend vers l'infini. Cependant, en raison du facteur  $b$  devant le

potentiel  $V$ , l'opérateur  $bVR_0(\lambda b, b)$  n'est pas petit lorsque  $b$  tend vers l'infini. On n'est donc plus dans un régime "haute énergie" mais dans un régime "semiclassique" comme on le verra plus loin.

Il est très instructif de commencer par examiner le cas élémentaire suivant. Supposons que le potentiel  $V$  ne dépend que de  $z$  (i.e.  $W = 0$ ). Alors l'opérateur de multiplication par  $V$  et les projecteurs  $\tilde{\Pi}_q$  commutent. Dans ce cas, en posant  $h = b^{-1/2}$ , on déduit de la formule (1.3.40) et de la définition de  $\mathcal{F}_0(E)$  que

$$V(x, y, z) = V^\infty(z) + W(x, y, w), \quad \forall x, y \in \mathbb{R}, z \in \mathbb{R}^{n-2} \quad (1.3.41)$$

avec  $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{n-2})$ ,  $W \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$  et  $V^\infty, W \geq 0$ .

$$V(x, y, z) = V^\infty(z) + W(x, y, w), \quad \forall x, y \in \mathbb{R}, z \in \mathbb{R}^{n-2} \quad (1.3.42)$$

avec  $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{n-2})$ ,  $W \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$  et  $V^\infty, W \geq 0$ .

$$T(\omega, \omega', \lambda b, b) = \sum_{\Lambda_q \leq \lambda} T_L(\omega, \omega', \lambda - \Lambda_q, h) \tilde{\Pi}_q$$

où  $T_L(\omega, \omega', E, h)$  est l'amplitude de diffusion pour la paire  $(-h^2\Delta_z, -h^2\Delta_z + V(z))$  à l'énergie  $E$ .

Par ailleurs, il est bien connu depuis les travaux de Vainberg [Vai77] et Robert-Tamura [RT89] que le comportement de l'amplitude de diffusion au niveau d'énergie  $E$  dépend (dans la limite semiclassique  $h \rightarrow 0$ ) de la nature des trajectoires classiques du flot Hamiltonien associé sur la surface d'énergie  $E$ . Lorsque l'énergie  $E$  est non-captive, le comportement de  $T_L(\omega, \omega', E, h)$  est décrit par le Théorème 1.1.2. Lorsqu'il existe des trajectoires captées sur la surface d'énergie  $E$ , la description de l'amplitude de diffusion est possible (c.f. par exemple [Mic05a], [ABR08], [LBM99]) mais plus compliquée. Ceci nous conduira donc à faire une hypothèse de non capture pour les niveaux d'énergie  $\lambda - \Lambda_q$ .

Revenons au cas général où  $W$  n'est pas nécessairement nul. A partir de maintenant, on suppose que  $\lambda \in ]\Lambda_{q_0}, \Lambda_{q_0+1}[$  pour un certain  $q_0 \in \mathbb{N}^*$ . Pour  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ , on introduit le symbole (en la variable  $(z, \xi)$ )  $p_{x,y}(z, \xi) = \xi^2 + V(x, y, z)$ ,  $\forall (z, \xi) \in T^*\mathbb{R}^{n-2}$  et l'on note  $t \mapsto \exp(tH_{p_{x,y}})(z, \xi)$  la solution du système Hamiltonien

$$\dot{Z} = 2Z^*, \quad \dot{Z}^* = -\nabla_z V(x, y, Z) \quad (1.3.43)$$

avec donnée initiale  $(z, \xi)$  en  $t = 0$ . Dans toute la suite, on note  $\lambda_q = \lambda - \Lambda_q$ . On fera l'hypothèse de non-capture suivante :

**Hypothèse 4** *Pour tout  $q = 1, \dots, q_0$  et pour tout  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ ,*

$$\lim_{|t| \rightarrow \infty} |\exp(tH_{p_{x,y}})(z, \xi)| = +\infty$$

*quelque soit  $(z, \xi) \in T^*\mathbb{R}^{n-2}$  vérifiant  $\xi^2 + V(x, y, z) = \lambda - \Lambda_q$ .*

Il est important de remarquer que si les  $\lambda_q$ ,  $q = 1, \dots, q_0$  sont non captifs pour le symbole  $\xi^2 + V^\infty(z)$  au sens de [RT89] et si  $W, \nabla_z W$  sont suffisamment petits en norme  $C^0$  alors l'hypothèse 4 est vérifiée. D'autre part, si l'on suppose que  $V^\infty$  est identiquement nul, c'est à dire  $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ , alors l'hypothèse 4 ne peut être satisfaite que si  $\sup_{\mathbb{R}^n} |V| < \lambda_{q_0}$ . C'est pour éviter ce genre de restrictions que nous étudions des perturbations de potentiels dépendant uniquement de la variable  $z$ .

Commençons par regarder la dimension  $n = 3$ . Dans ce cas la structure des trajectoires classiques est assez simple et l'hypothèse précédente est suffisante pour énoncer un théorème. Notons

$$S(E, b) = \begin{pmatrix} S_{11}(E, b) & S_{12}(E, b) \\ S_{21}(E, b) & S_{22}(E, b) \end{pmatrix}$$

la matrice de diffusion en dimension 3, avec  $S_{ij}(E, b) \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))$ . Il est bien connu que  $S_{11}(E, b) = S_{22}(E, b)$  de sorte qu'il suffit d'étudier  $S_{11}$ ,  $S_{12}$  et  $S_{21}$ . Les niveaux d'énergie captifs en dimension 1 sont décrits dans les travaux de Knauf [Kna99], et l'on déduit de l'hypothèse 4, qu'il existe  $q_1 \in \{1, \dots, q_0 + 1\}$  tel que :

- pour tout  $q \in \{1, \dots, q_1 - 1\}$  et pour tout  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ ,  $\lambda_q > \sup_{z \in \mathbb{R}} V(x, y, z)$
- pour tout  $q \in \{q_1, \dots, q_0\}$  et pour tout  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ , l'équation  $V(x, y, z) = \lambda_q$  a exactement deux solutions  $\alpha_q(x, y) < \beta_q(x, y)$  et ces solutions ne sont pas des points critiques.

On remarquera que les fonctions  $\alpha_q$  et  $\beta_q$  dépendent de manière régulière de la variable  $(x, y)$  et sont indépendantes de  $(x, y)$  lorsque  $|(x, y)| \gg 1$  (les supports de  $V^\infty, W$  étant compact.)

**Théorème 1.3.10** *Supposons que  $n = 3$  et que l'hypothèse 4 est vérifiée. Il existe des symboles  $s_{d,q}, r_{d,q}, s_{a,q}, r_{a,q}, s_{e,q}, r_{e,q}$  appartenant à la classe  $S_{\frac{1}{2}}(\mathbb{R}^2, b^{-1})$  tels que :*

- les coefficients diagonaux de  $S(\lambda b, b)$  vérifient les asymptotiques suivantes :

$$S_{11}(\lambda b, b) = \sum_{q=1}^{q_1-1} s_{d,q}^w(\lambda, y/2 - b^{-1}D_x, x/2 - b^{-1}D_y) \tilde{\Pi}_q + \mathcal{O}(b^{-\infty})$$

dans  $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^2))$ , avec

$$s_{d,q}(\lambda, y, \eta) = \exp(ib^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} \sqrt{\lambda_q - V(\eta, y, z) - \sqrt{\lambda_q} dz} + b^{-1/2} r_{d,q}(\lambda, y, \eta)).$$

- les coefficients anti-diagonaux vérifient

$$S_{21}(\lambda b, b) = \sum_{q=q_1}^{q_0} s_{a,q}^w(\lambda, y/2 - b^{-1}D_x, x/2 - b^{-1}D_y) \tilde{\Pi}_q + \mathcal{O}(b^{-\infty})$$

dans  $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^2))$ , avec

$$s_{a,q}(\lambda, y, \eta) = i \exp(2ib^{1/2}(\sqrt{\lambda_q} \alpha_q(\eta, y) + \int_{-\infty}^{\alpha_q(\eta, y)} \sqrt{\lambda_q - V(\eta, y, z) - \sqrt{\lambda_q} dz})) + b^{-1/2} r_{a,q}(\lambda, y, \eta).$$

et

$$S_{12}(\lambda b, b) = \sum_{q=q_1}^{q_0} s_{e,q}^w(\lambda, y/2 - b^{-1}D_x, x/2 - b^{-1}D_y) \tilde{\Pi}_q + \mathcal{O}(b^{-\infty})$$

dans  $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^2))$ , avec

$$s_{e,q}(\lambda, y, \eta) = i \exp(2ib^{1/2}(\sqrt{\lambda_q} \beta_q(\eta, y) - \int_{\beta_q(\eta, y)}^{+\infty} \sqrt{\lambda_q - V(\eta, y, z) - \sqrt{\lambda_q} dz})) + b^{-1/2} r_{e,q}(\lambda, y, \eta)$$



Les résultats précédents sont valables sous l'hypothèse que les  $\lambda_q$  sont non-captifs. Une généralisation au cas d'énergies captive devrait être possible en utilisant les travaux de Ramond [Ram96].

Passons maintenant au cas de la dimension  $n \geq 4$ . Nous avons besoin d'une hypothèse supplémentaire sur le flot classique qui joue le rôle de l'hypothèse " $\omega'$  régulière pour  $(\lambda, \omega)$ " dans le théorème 1.1.2. Soient  $\omega$  et  $\omega'$  fixés dans  $S^{n-3}$  et tels que  $\omega \neq \omega'$ . On note  $\Upsilon_\omega$  l'hyperplan de  $\mathbb{R}^{n-2}$  orthogonal à  $\omega$ . On note  $\tilde{z} = (z_1, \dots, z_{n-3})$  un système de coordonnées dans  $\Upsilon_\omega$  et  $\hat{z} = \tilde{z} + 0\omega \in \mathbb{R}^{n-2}$ . Comme le potentiel  $V$  est à support compact dans la variable  $z$ , il existe un compact hors duquel les solutions de (1.3.43) sont des droites. De plus, on voit facilement que pour tout  $q = 1, \dots, q_0$ ,  $\tilde{z} \in \Upsilon_\omega$ , il existe une unique solution  $(Z_{q,\infty}(t, x, y, \tilde{z}, \omega), Z_{q,\infty}^*(t, x, y, \tilde{z}, \omega))$  de (1.3.43) telle que pour  $-t > 0$  assez grand, on ait

$$Z_{q,\infty}(t, x, y, \tilde{z}, \omega) = \sqrt{\lambda_q} \omega t + \hat{z}.$$

On remarque au passage que  $Z_{q,\infty}$  et  $Z_{q,\infty}^*$  dépendent de  $(x, y)$ . En l'absence d'ambiguïté, on ne notera pas cette dépendance afin d'alléger les notations.

Sous l'hypothèse 4, on peut préciser le comportement de ces particules lorsque  $t \rightarrow +\infty$ . En effet, le support de  $V$  étant compact par rapport à  $z$ , il existe  $\theta_{q,\infty}(x, y, \tilde{z}, \omega) \in S^{n-3}$  et  $r_{q,\infty}(x, y, \tilde{z}, \omega) \in \mathbb{R}^{n-2}$  tels que pour  $t > 0$  assez grand

$$Z_{q,\infty}(t, x, y, \tilde{z}, \omega) = 2\sqrt{\lambda_q} \theta_{q,\infty}(x, y, \tilde{z}, \omega) t + r_{q,\infty}(x, y, \tilde{z}, \omega) \quad (1.3.44)$$

$$Z_{q,\infty}^*(t, x, y, \tilde{z}, \omega) = \sqrt{\lambda_q} \theta_{q,\infty}(x, y, \tilde{z}, \omega). \quad (1.3.45)$$

Pour  $\tilde{z} \in \Upsilon_\omega$ , on définit la densité angulaire par

$$\hat{\sigma}_q(x, y, \tilde{z}) = |\det(\theta_{q,\infty}, \partial_{z_1} \theta_{q,\infty}, \dots, \partial_{z_{n-3}} \theta_{q,\infty})| \quad (1.3.46)$$

On introduit l'hypothèse suivante :

**Hypothèse 5** *On suppose que pour tout  $q \in \{1, \dots, q_0\}$ ,  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$  et  $\tilde{z} \in \Upsilon_\omega$  vérifiant  $\theta_{q,\infty}(x, y, \tilde{z}) = \omega'$ , on a  $\hat{\sigma}_q(x, y, \tilde{z}) \neq 0$ .*

Lorsque cette hypothèse est vérifiée, on dit que  $\omega'$  est régulière par rapport à  $(\lambda, \omega)$ .

On remarque à nouveau que si  $W$  et  $\nabla_z W$  sont assez petits (en norme  $L^\infty$ ), l'hypothèse 5 est satisfaite dès lors que  $q \in \{1, \dots, q_0\}$ ,  $\omega'$  est régulier (au sens de la définition 1.1.1) pour tous les couples  $(\lambda_q, \omega)$  et pour le symbole  $\xi^2 + V^\infty(z)$ .

Supposons que la direction  $\omega'$  est régulière par rapport à  $\omega$ . Pour tout  $q \in \{1, \dots, q_0\}$  et  $(x, y) \in \mathbb{R}^2$  fixés, on déduit du théorème des fonctions implicites qu'il existe  $l_q = l_q(x, y) \in \mathbb{N}$  et  $\tilde{z}_{q,1}(x, y), \dots, \tilde{z}_{q,l_q}(x, y) \in \Upsilon_\omega$  tels que

$$\theta_{q,\infty}(x, y, z) = \omega' \iff z \in \{\tilde{z}_{q,1}, \dots, \tilde{z}_{q,l_q}\}.$$

Comme  $W$  est à support compact, on peut utiliser le théorème d'inversion local comme dans la Proposition A.1 de [Mic02], pour montrer que la fonction  $(x, y) \mapsto l_q(x, y)$  est constante sur  $\mathbb{R}^2$ . De plus, en utilisant le théorème d'inversion locale et en choisissant convenablement la numérotation, on montre que les fonctions  $(x, y) \mapsto \tilde{z}_{q,j}(x, y)$  sont de classe  $C^\infty$ . Enfin, comme  $W$  est à support compact, ces fonctions sont constantes à l'infini et par conséquent elles appartiennent à la classe  $S^0(\mathbb{R}^2)$ .



**Théorème 1.3.11** *Supposons que  $n \geq 4$  et que les directions  $(\omega, \omega') \in S^{n-3} \times S^{n-3}$  avec  $\omega \neq \omega'$  vérifient les hypothèses 4 et 5. Alors  $\lambda b \notin \sigma_{pp}(\mathbf{H}(b))$  et il existe une suite  $T_{q,j}(\omega, \omega', \lambda, b, \cdot, \cdot)$ ,  $q = 1, \dots, q_0$ ,  $j \in \mathbb{N}$  de symboles appartenant à la classe  $S_{\frac{1}{2}}(\mathbb{R}^2, b^{-1})$  telle que pour tout  $N \in \mathbb{N}$ ,*

$$T(\omega, \omega', \lambda b, b) = b^{\frac{n-3}{4}} \sum_{q=1}^{q_0} \lambda_q^{\frac{n-3}{4}} T_q(\omega, \omega', \lambda b, b) \widetilde{\Pi}_q + \mathcal{O}(b^{\frac{n-3}{4}-N})$$

dans  $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^2))$ , avec

$$T_q(\omega, \omega', \lambda b, b) = \sum_{j=0}^N b^{-j/2} T_{q,j}^w(\omega, \omega', \lambda, b, y/2 - b^{-1}D_x, x/2 + b^{-1}D_y).$$

De plus,

$$T_{q,0}(\omega, \omega', \lambda, b, y, \eta) = c(n) \sum_{l=1}^{l_q} \widehat{\sigma}_q(\eta, y, \tilde{z}_{q,l}(\eta, y))^{-1/2} e^{ib^{1/2} \mathbf{S}_{\mathbf{q},l}(y, \eta) - i\mu_{q,l}\pi/2}$$

où  $c(n) = \frac{1}{2} e^{i(n-3)\pi/4} (2\pi)^{-(n-3)/2}$ ,

$$\begin{aligned} \mathbf{S}_{\mathbf{q},l}(y, \eta) = & \int_{-\infty}^{+\infty} (|Z_{q,\infty}^*(t, \eta, y, \tilde{z}_{q,l}(\eta, y), \omega)|^2 \\ & - V(\eta, y, Z_{q,\infty}(t, \eta, y, \tilde{z}_{q,l}(\eta, y), \omega)) - \lambda + \Lambda_q) dt \\ & - r_{q,\infty}(\eta, y, \tilde{z}_{q,l}(\eta, y), \omega) \end{aligned}$$

et  $\mu_{q,l}$  est l'indice de Maslov de la trajectoire  $(Z_{q,\infty}, Z_{q,\infty}^*)(t, \eta, y, \tilde{z}_{q,l}(\eta, y), \omega)$  sur la variété Lagrangienne

$$\{(z, \xi) \in T^*\mathbb{R}^{n-2} \mid z = Z_{q,\infty}(t, \eta, y, \tilde{z}, \omega), \xi = Z_{q,\infty}^*(t, \eta, y, \tilde{z}, \omega)\}. \tilde{z} \in \Upsilon_q, t \in \mathbb{R}\}$$

En outre,  $\mu_{q,l}$  ne dépend pas de  $(y, \eta)$ .

On remarque qu'en vertu de la forme spéciale des symboles, les opérateurs  $T_q$  et  $\widetilde{\Pi}_q$  ci-dessus commutent. Ce sera encore plus évident au cours de la démonstration, quand après transformations unitaires, ils agiront sur des variables séparées.

Ce résultat doit être comparé aux résultats obtenus par Vainberg [Vai77] et Robert-Tamura [RT89] sur l'équation de Schrödinger sans champ magnétique dans la limite semiclassique. Dans leur situation, la seule variable est  $z$  et l'amplitude de diffusion est une fonction dont le terme principal (quand  $h \rightarrow 0$ ) est donné par la dynamique Hamiltonienne (cf Théorème 1.1.2). Ici, on montre que l'amplitude de diffusion est un opérateur pseudo-différentiel dans la variable  $(x, y)$  dont le terme principal est donné par la quantification magnétique (dans la variable  $(x, y)$ ) du terme dominant de Vainberg, Robert-Tamura pour le potentiel  $z \mapsto V(x, y, z)$ . Dans le cas  $V = V^\infty(z)$ , ceci est en accord avec la discussion précédent le Théorème 1.3.10.

Passons maintenant à la démonstration des théorèmes 1.3.10 et 1.3.11.

## Réduction à un Hamiltonien effectif

On rappelle que  $\lambda$  est fixé dans un intervalle  $]\Lambda_{q_0}, \Lambda_{q_0+1}]$ , pour un certain  $q_0 \in \mathbb{N}^*$ . Dans cette section, on élimine la partie de l'opérateur correspondant à des énergies trop hautes en considérant un problème de Grushin convenable. On commence par rappeler que  $\widehat{H}_0$  est conjugué à un oscillateur harmonique agissant dans la seule variable  $x$ . Ceci suggère une conjugaison naturelle de l'opérateur  $H(b)$ . Plus précisément, pour  $f \in L^2(\mathbb{R}^n)$ , on définit

$$U f(x, y, z) = \frac{b^{3/4}}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^2} e^{i\varphi_b(x, y, x', y')} f(x', y', z) dx' dy',$$

avec  $\varphi_b(x, y, x', y') = \frac{b}{2}xy + b^{1/2}(y' - y)x' - bx'y'$ . Alors  $U$  est unitaire de  $L^2(\mathbb{R}^n)$  dans lui même et

$$U H(b) U^* = -\Delta_z + bN_x + bV^w(b^{-1}D_y + b^{-1/2}D_x, y - b^{-1/2}x, z), \quad (1.3.47)$$

où  $N_x = -\frac{d^2}{dx^2} + x^2$  désigne l'oscillateur harmonique dans la variable  $x$ . De plus,  $U$  est en fait un opérateur métaplectique associé à une transformation canonique  $\kappa$  dont on calcule facilement l'inverse.

Si l'on introduit le paramètre semiclassique  $h = b^{-1/2} > 0$  qui tend vers 0 lorsque  $b$  tend vers l'infini, l'équation (1.3.47) s'écrit

$$U H(b) U^* = b(-h^2\Delta_z + N_x + V^w(h^2D_y + hD_x, y - hx, z)). \quad (1.3.48)$$

et on note par ailleurs que cet opérateur a pour domaine  $\mathcal{D} = D(N_x) \otimes L^2(\mathbb{R}_y) \otimes H^2(\mathbb{R}_z^{n-2})$ , où  $D(N_x)$  désigne le domaine de l'oscillateur harmonique. Pour  $j \in \mathbb{N}$ , on note  $\phi_j \in L^2(\mathbb{R}_x)$  la  $j$ -ème fonction propre de l'oscillateur harmonique  $N_x\phi_j = \Lambda_j\phi_j$  telle que  $\|\phi_j\|_{L^2(\mathbb{R})} = 1$ . On définit  $R_-$  de  $L^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1})^{q_0}$  dans  $L^2(\mathbb{R}^n)$  par

$$R_-(\varphi_1, \dots, \varphi_{q_0})(x, y, z) = \sum_{q=1}^{q_0} \varphi_q(y, z) \phi_q(x),$$

et  $R_+$  de  $L^2(\mathbb{R}^n)$  sur  $L^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1})^{q_0}$  par

$$R_+\phi = (\langle \phi, \phi_1 \rangle_{L^2(\mathbb{R}_x)}, \dots, \langle \phi, \phi_{q_0} \rangle_{L^2(\mathbb{R}_x)}).$$

On note  $\Pi_q = U^* \widetilde{\Pi}_q \otimes \text{Id}_z U$  le projecteur sur  $\text{Vect}(\phi_q) \otimes L^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1})$ ,  $\Pi = \sum_{q=1}^{q_0} \Pi_q$  et  $\widehat{\Pi} = \text{Id} - \Pi$ . On a alors

$$R_+R_- = \text{Id} \text{ and } R_-R_+ = \Pi \quad (1.3.49)$$

Introduisons maintenant  $F_{q_0} = \{s \in \mathbb{C}, \text{Im } s \geq 0 \text{ et } \text{Re } s = \lambda\}$  et pour  $s \in F_{q_0}$ , l'opérateur  $\mathcal{P}(s) : \mathcal{D} \times L^2(\mathbb{R}^{n-1})^{q_0} \rightarrow L^2(\mathbb{R}^n) \times \widetilde{\mathcal{D}}^{q_0}$  défini par

$$\mathcal{P}(s) = \begin{pmatrix} \widetilde{P}(h) - s & R_- \\ R_+ & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.3.50)$$

avec  $\widetilde{P}(h) = -h^2\Delta_z + N_x + V^w(h^2D_y + hD_x, y - hx, z)$  et  $\widetilde{\mathcal{D}} = L^2(\mathbb{R}_y, H^2(\mathbb{R}_z^{n-2}))$ . Pour  $u \in \mathcal{D}$  et  $v \in \widetilde{\mathcal{D}}$  on pose

$$\|u\|_{\mathcal{D}} = \|N_x u\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} + \sum_{j=0}^2 \|(hD_z)^j u\|_{L^2(\mathbb{R}^n)} \text{ et } \|v\|_{\widetilde{\mathcal{D}}} = \sum_{j=0}^2 \|(hD_z)^j v\|_{L^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1})}.$$

On a alors la proposition suivante, dont la preuve est classique.

**Proposition 1.3.12** *Pour  $s \in F_{q_0}$ , l'opérateur  $\mathcal{P}(s)$  est inversible et son inverse  $\mathcal{E}(s) : L^2(\mathbb{R}^n) \times \tilde{\mathcal{D}}^{q_0} \rightarrow \mathcal{D} \times L^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1})^{q_0}$  vérifie  $\|\mathcal{E}(s)\|_{L^2(\mathbb{R}^n) \times \tilde{\mathcal{D}}^{q_0}, \mathcal{D} \times L^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1})^{q_0}} = \mathcal{O}(1)$  uniformément par rapport à  $s \in F_{q_0}$  et  $h \in ]0, 1]$ .*

On va utiliser ce problème de Grushin pour étudier la résolvante de  $\tilde{P}(h)$ . Pour  $s \in F_{q_0}$ , on introduit la notation

$$\mathcal{E}(s) = \begin{pmatrix} E(s) & E_+(s) \\ E_-(s) & -E_{\pm}(s) \end{pmatrix}.$$

Pour  $s \in F_{q_0} \cap \{\text{Im } s > 0\}$ , on a les relations usuelles  $R_+ E_+(s) = Id$ ,  $E_- R_- = Id$ ,  $\Pi E_+(s) = R_-$  et

$$(\tilde{P}(h) - s)^{-1} = E(s) + E_+(s) E_{\pm}(s)^{-1} E_-(s), \quad (1.3.51)$$

où  $E_{\pm}(s) = R_+(\tilde{P}(h) - s)E_+$  est inversible pour  $s \in F_{q_0} \cap \{\text{Im } s > 0\}$ .

A nouveau, on a la proposition suivante dont la preuve est quasiment algébrique.

**Proposition 1.3.13** *Supposons que  $s \in F_{q_0} \cap \{\text{Im } s > 0\}$ , alors on a*

$$E(s) = (\hat{P}(h) - s)^{-1} \hat{\Pi}$$

et

$$E_{\pm}(s) = R_+(\tilde{P}(h) - s)R_- - R_+\tilde{P}(h)\hat{\Pi}(\hat{P}(h) - s)^{-1}\hat{\Pi}\tilde{P}(h)R_-. \quad (1.3.52)$$

Pour  $s \in F_{q_0} \cap \{\text{Im } s > 0\}$ , on peut multiplier (1.3.51) par  $R_+$  à gauche et par  $R_-$  à droite. On obtient

$$R_+(\tilde{P}(h) - s)^{-1}R_- = E_{\pm}(s)^{-1}. \quad (1.3.53)$$

La proposition suivante fournit une description précise de l'hamiltonien effectif  $E_{\pm}(s)$ . L'ensemble  $S(\mathbb{R}^{2n-2}, \langle \xi \rangle^k, \mathcal{L}(\mathbb{C}^{q_0}))$  y désigne les symboles sur  $\mathbb{R}^{2n-2}$  pour la fonction d'ordre  $\langle \xi \rangle^k$ , et à valeur dans l'ensemble des matrices  $\mathcal{L}(\mathbb{C}^{q_0})$ .

**Proposition 1.3.14** *Supposons que  $s \in F_{q_0}$ . Alors, il existe une suite de symboles matriciels  $(E_j(y, \eta, z, \xi, s))_{j \in \mathbb{N}}$  telle que  $E_0 \in S(\mathbb{R}^{2n-2}, \langle \xi \rangle^2, \mathcal{L}(\mathbb{C}^{q_0}))$ ,  $E_j \in S(\mathbb{R}^{2n-2}, 1, \mathcal{L}(\mathbb{C}^{q_0}))$ ,  $\forall j \geq 1$  et pour tout  $N \in \mathbb{N}^*$ ,*

$$E_{\pm}(s) = \sum_{j=0}^N h^j E_j^w(y, h^2 D_y, z, h D_z, s) + R_N(h, s),$$

avec  $\|R_N(h, s)\|_{L^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1}), L^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1})} = \mathcal{O}(h^N)$  uniformément par rapport à  $s \in F_{q_0}$ . De plus, on a

$$E_0(y, \eta, z, \xi, s) = \text{diag}((\xi^2 + V(\eta, y, z) + \Lambda_j - s)_{j=1, \dots, q_0}),$$

les coefficients diagonaux de  $E_1$  sont nuls et pour tout  $j \geq 1$  les semi-normes des  $E_j$  sont bornées uniformément par rapport à  $s \in F_{q_0}$ .

*Preuve.* La preuve est basée sur un développement de Taylor de

$$\langle W^w(h^2 D_y + h D_x, y - hx, z) \phi_p, \phi_q \rangle_{L^2(\mathbb{R}_x)},$$

les propriétés d'orthogonalité des fonctions  $\phi_q$  et la construction d'une paramétrix de  $(\hat{P}(h) - s)^{-1}$ . On renvoie à [Mic05c] pour les détails.  $\square$

## Estimations de la résolvante

La seconde étape de la preuve consiste à obtenir de bonnes estimations de la résolvante. Le point clef est la construction d'une fonction de fuite globale pour le symbole  $p_{x,y}$  "uniforme en  $(x, y)$ ."

**Lemme 1.3.15** *Supposons que  $\lambda$  vérifie l'hypothèse 4 et soit  $q \in \{1, \dots, q_0\}$ . Soit  $K$  un compact de  $\cup_{(x,y) \in \mathbb{R}^2} p_{x,y}^{-1}([\lambda_q - \epsilon, \lambda_q + \epsilon])$ . Alors, il existe une fonction  $G_q(x, y, z, \xi) \in C_b^\infty(\mathbb{R}^2 \times T^*\mathbb{R}^{n-2})$  telle que  $H_{p_{x,y}} G_q \geq 0$  et*

$$\forall (x, y) \in \mathbb{R}^2, \forall (z, \xi) \in K, H_{p_{x,y}} G_q \geq 1$$

*Preuve.* La preuve repose sur l'existence d'une fonction de fuite globale pour l'opérateur de Schrödinger pour des énergies non captives [GM88], [GS87]. Il s'agit ici de contrôler la dépendance par rapport à  $(x, y)$  en reprenant la construction de [GM88].  $\square$

Comme corollaire immédiat de cette construction, on déduit l'absence de valeurs propres de  $H(b)$  loin des niveaux de Landau pour  $b$  grand.

**Corollaire 1.3.16** *Supposons que  $\lambda$  vérifie l'hypothèse 4, alors pour  $b$  assez grand,  $\lambda b \notin \sigma_{pp}(H(b))$ .*

Le résultat principal de cette section affirme qu'à l'instar du cas où le champ magnétique est nul, l'hypothèse de non capture conduit à une estimation de la résolvante en  $O(h^{-1})$ .

**Proposition 1.3.17** *Supposons que l'hypothèse 4 est vérifiée, alors*

$$\|E_\pm(\lambda)^{-1}\|_{L_\alpha^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1})^{q_0}, L_{-\alpha}^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1})^{q_0}} = \mathcal{O}(h^{-1})$$

pour tout  $\alpha > 1/2$ .

*Preuve.* En utilisant l'existence d'une fonction de fuite globale, on construit un opérateur conjugué exact pour l'opérateur  $E_\pm(\lambda)$ . On peut alors suivre les travaux de Mourre [Mou81] (voir aussi [Gér90] pour une version semiclassique) pour obtenir l'estimation annoncée.  $\square$

## Diagonalisation du problème

D'après le corollaire précédent, on sait que pour  $b$  suffisamment grand  $\lambda b$  n'est pas valeur propre de  $H(b)$ . On déduit donc de la discussion suivant le Théorème 1.3.1 que la matrice de diffusion à l'énergie  $\lambda b$  est bien définie et peut s'écrire sous la forme suivante

$$S(\lambda b, b) - Id = -2i\pi \mathcal{F}_0(\lambda b) [\Delta_z, \chi_1] R(\lambda b + i0) [\Delta_z, \chi_2] \mathcal{F}_0(\lambda b)^*. \quad (1.3.54)$$

Par ailleurs, on déduit de (1.3.48) que

$$R(\lambda b + i0) = h^2 U^* (\tilde{P}(h) - \lambda - i0)^{-1} U$$

où  $(\tilde{P}(h) - \lambda - i0)^{-1} = \lim_{\mu \rightarrow 0^+} (\tilde{P}(h) - \lambda - i\mu)^{-1}$  existe dans  $\mathcal{L}(L_\alpha^2, L_{-\alpha}^2)$  pour tout  $\alpha > 1/2$ . En reportant cette expression dans (1.3.54) et en utilisant le fait que  $U$  agit seulement dans la variable  $(x, y)$  et que  $\mathcal{F}_0(\lambda)$  projette sur les niveaux de Landau  $b\Lambda_q \leq \lambda$ , on obtient

$$T(\lambda b, b) = -2i\pi h^2 U^* \mathcal{F}_h(\lambda) [\Delta_z, \chi_1] E_\pm(\lambda)^{-1} [\Delta_z, \chi_2] \mathcal{F}_h(\lambda)^* U, \quad (1.3.55)$$

où  $E_\pm(\lambda)^{-1} = \lim_{\mu \rightarrow 0^+} E_\pm(\lambda + i\mu)^{-1}$  existe dans  $\mathcal{L}((L_\alpha^2)^{q_0}, (L_{-\alpha}^2)^{q_0})$  pour  $\alpha > 1/2$  et  $\mathcal{F}_h(\lambda) : L_\alpha^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1})^{q_0} \rightarrow L^2(\mathbb{R}_{x,y}^2)$  est définie par  $\mathcal{F}_h(\lambda) = \mathcal{F}_0(h^{-2}\lambda) R_-$ .

Afin d'analyser finement la résolvante  $E_\pm(\lambda)^{-1}$ , on a besoin de diagonaliser l'opérateur  $E_\pm(\lambda)$ .

**Proposition 1.3.18** *Pour tout  $N_0 \in \mathbb{N}^*$  il existe une transformation unitaire  $U_{N_0}$  on  $L^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1})$  telle que*

$$T(\lambda b, b) = -2i\pi h^{-2} U^* U_{N_0}^* \mathcal{F}_h(\lambda) [h^2 \Delta_z, \chi_1] \mathcal{P}_{N_0}(\lambda)^{-1} [h^2 \Delta_z, \chi_2] \mathcal{F}_h(\lambda)^* U_{N_0} U + \mathcal{O}(h^{N_0}) \quad (1.3.56)$$

avec

$$\mathcal{P}_{N_0}(\lambda) = \text{diag}((p_q^w(y, z, h^2 D_y, h D_z, N_0) - \lambda_q)_{q=1, \dots, q_0})$$

et  $p_q(\cdot, N_0) \in S(T^*\mathbb{R}^{n-1}, \langle \xi \rangle^2)$ . De plus,  $p_q(y, z, \eta, \xi, N_0) = \sum_{m=0}^{N_0} h^m p_{q,m}(y, z, \eta, \xi)$  avec  $p_{q,0} = \xi^2 + V(\eta, y, z)$ ,  $p_{q,m} \in S(T^*\mathbb{R}^{n-1})$  pour  $m \geq 1$  et  $p_{q,m}$  à support compact en  $z$ .

*Preuve.* Montrons juste comment éliminer les coefficients non-diagonaux d'ordre  $h$ . On part de la formule (1.3.55) et on cherche  $U_{N_0}$  telle que

$$U_{N_0} E_{\pm}(\lambda) U_{N_0}^* = \mathcal{P}_{N_0}(\lambda) + h^{N_0} R_{N_0}(h).$$

On cherche  $U_{N_0}$  sous la forme

$$U_{N_0} = \exp(hu^w(y, z, h^2 D_y, h D_z))$$

avec  $u = (u_{i,j})_{i,j=1, \dots, q_0}$  tel que  $u_{i,j} \in S(T^*\mathbb{R}^{n-1})$  est à valeurs réelles et  $u_{i,j} = -u_{j,i}$  pour tout  $i, j$ . Dans ces conditions,  $U_{N_0}$  est clairement unitaire et  $U_{N_0}^* = \exp(-hu^w(y, z, h^2 D_y, h D_z))$ . En notant

$$C_{N_0} = U_{N_0} E_{\pm}(\lambda) U_{N_0}^*,$$

et en écrivant le développement de Taylor de la fonction exponentielle, on

$$C_N = E_0^w(\dots) + h(E_1^w(\dots) + u^w(\dots)E_0^w(\dots) - E_0^w(\dots)u^w(\dots)) + \mathcal{O}(h^2), \quad (1.3.57)$$

où  $(\dots) = (y, z, h^2 D_y, h D_z)$ . Il s'agit donc de trouver  $u$  telle que

$$E_1^w(\dots) = E_0^w(\dots)u^w(\dots) - u^w(\dots)E_0^w(\dots) + \mathcal{O}(h^2).$$

Un simple calcul matriciel combiné à du calcul symbolique montre qu'on doit résoudre

$$E_{0,i,i}u_{i,j} - u_{i,j}E_{0,j,j} = E_{1,i,j}$$

pour tout  $i < j = 1, \dots, q_0$ , où l'on note  $(E_{k,i,j})_{i,j}$  les coefficients de la matrice  $E_k$ . En prenant

$$u_{i,j}(y, z, \eta, \xi) = \frac{1}{\Lambda_i - \Lambda_j} E_{1,i,j}(y, z, \eta, \xi)$$

pour  $i \neq j$  et  $u_{i,i} = 0$  pour  $i = 1, \dots, q_0$ , on obtient le résultat dans le cas  $N_0 = 2$ . Pour l'obtenir à tout ordre, il suffit d'itérer le procédé.  $\square$

### Localisation en temps fini

L'idée principale pour achever la preuve est d'écrire la résolvante  $\mathcal{P}_{N_0}(\lambda)^{-1}$  à l'aide du propagateur :

$$\mathcal{P}_{N_0}(\lambda)^{-1} = ih^{-1} \int_0^T e^{-ih^{-1}t\mathcal{P}_{N_0}(\lambda)} dt + \mathcal{P}_{N_0}(\lambda)^{-1} e^{-ih^{-1}T\mathcal{P}_{N_0}(\lambda)}, \quad (1.3.58)$$

On montre ensuite que le second terme du membre de droite est  $O(h^\infty)$  puis on conclut en approchant le propagateur  $e^{-ih^{-1}t\mathcal{P}_{N_0}(\lambda)}$  par la théorie de Maslov sur des intervalles de temps fini. La première étape consiste donc à montrer que pour  $T$  assez grand et pour toute fonction  $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}_z^{n-2})$ , l'opérateur  $\chi\mathcal{P}_{N_0}(\lambda)^{-1}e^{-ih^{-1}T\mathcal{P}_{N_0}(\lambda)}\chi$  est  $O(h^\infty)$  dans  $L^2$ .

Pour cela, on commence par démontrer un Lemme d'Egorov adapté à notre situation. On note  $\phi_t : T^*\mathbb{R}^{n-1} \rightarrow T^*\mathbb{R}^{n-1}$  l'application définie par

$$\phi_t(y, z, \eta, \xi) = \exp(tH_{p_{\eta,y}})(z, \xi).$$

**Lemme 1.3.19** *Soit  $\omega_1, \omega_2 \in S(T^*\mathbb{R}^{n-1})$  tels que  $\text{supp } \omega_2 \cap \phi_t(\text{supp } (\omega_1)) = \emptyset$  et  $\omega_1$  à support compact, alors*

$$\|\omega_2^w(y, z, h^2 D_y, h D_z) e^{-ih^{-1}t\mathcal{P}_{N_0}(\lambda)} \omega_1^w(y, z, h^2 D_y, h D_z)\|_{-\alpha, \alpha} = \mathcal{O}(h^\infty),$$

pour tout  $\alpha > 1/2$ .

*Preuve.* Comme  $e^{-ih^{-1}t\mathcal{P}_{N_0}(\lambda)} = \text{diag}(e^{-ih^{-1}t(P_q(h)-\lambda)}, q = 1, \dots, q_0)$ , il suffit de montrer que

$$\omega_2^w(y, z, h^2 D_y, h D_z) e^{-ih^{-1}tP_q(h)} \omega_1^w(y, z, h^2 D_y, h D_z) = \mathcal{O}(h^\infty).$$

On construit pour cela une paramétrix de  $e^{-ih^{-1}tP_q(h)} \omega_1^w(y, z, h^2 D_y, h D_z) e^{ih^{-1}tP_q(h)}$  et l'on cherche  $F(t) = f^w(t, y, z, h^2 D_y, h D_z)$  solution

$$ih\partial_t F(t) = [P_q(h), F(t)] \text{ et } f|_{t=0} = \omega_1. \quad (1.3.59)$$

En écrivant  $f$  sous la forme  $f = \sum_{j \geq 0} h^j f_j$  et en faisant un peu de calcul symbolique (grâce à la Proposition 1.3.18), on réduit le problème à la résolution de

$$i\partial_t f_0 = iH_{p_{\eta,y}} f_0 \text{ et } f_0|_{t=0} = \omega_1 \quad (1.3.60)$$

dont on déduit  $f_0 = \omega_1 \circ \phi_t$  et pour  $n \geq 1$ ,

$$i\partial_t f_n = iH_{p_{\eta,y}} f_n + a_n(t) \text{ et } f_n|_{t=0} = 0$$

pour un certain  $a_n$  construit à partir des  $f_m$ ,  $m < n$ . En particulier,  $a_n(s)$  est supporté dans  $\phi_{-s}(\text{supp } \omega_1)$  de sorte que  $f_n(t) = \frac{1}{i} \int_0^t a_n(s) \circ \phi_{t-s} ds$  est supporté dans  $\phi_{-t}(\text{supp } \omega_1)$ .  $\square$

En combinant la Proposition 1.3.18 et le Lemme précédent, on montre facilement qu'il existe  $T > 0$  assez grand tel que

$$T(\lambda b, b) = 2\pi h^{-3} \int_0^T U^* U_{N_0}^* \mathcal{F}_h(\lambda) [h^2 \Delta_z, \chi_1] e^{-ih^{-1}t\mathcal{P}_{N_0}(\lambda)} [h^2 \Delta_z, \chi_2] \mathcal{F}_h(\lambda)^* U_{N_0} U dt + \mathcal{O}(h^{N_0}) \quad (1.3.61)$$

## Fin de la preuve

On note  $c_0(h) = (1/2)h^{-(n-1)}(2\pi)^{-(n-3)}$ ,  $P_k(h) = p_k^w(y, z, h^2 D_y, h D_z)$  et

$$e_{q,\pm}(z, \lambda, \omega, h) = (\lambda_q)^{\frac{n-d}{4}} e^{\pm i h^{-1} \sqrt{\lambda_q} \langle z, \omega \rangle},$$

En partant de (1.3.61), on montre que

$$T(\omega, \omega', \lambda b, b) = c_0(h) \sum_{q=1}^{q_0} U^* f_q(\omega, \omega', \lambda, h) \otimes \Pi_q U + \mathcal{O}(h^{N_0-2}), \quad (1.3.62)$$

avec

$$f_q(\omega, \omega', \lambda, h) = \sum_{k=1}^{q_0} \int_0^{T_0} \int_{\mathbb{R}^{n-2}} e_{q-}(z, \lambda, \omega', h) a_{qk}^w(y, z, h^2 D_y, h D_z) e^{-i h^{-1} t (P_k(h) - \lambda_k)} b_{kq}^w((y, z, h^2 D_y, h D_z) e_{q+}(z, \lambda, \omega, h)) dz dt \quad (1.3.63)$$

où  $a_{qk}, b_{kq}$  sont des symboles dans la classe  $S(T^*\mathbb{R}^{n-1})$ . De plus, en utilisant à nouveau le Lemme d'Egorov, on peut supposer que ces symboles sont supportés (dans la variable  $z$ ) près des points d'un compact qui sont situés sur des trajectoires  $Z_{q,\infty}(s, \eta, y, \tilde{z}_{q,l}(\eta, y), \omega)$  avec  $s \ll -1$ .

La fin de la preuve consiste à construire à  $z$  fixé, une approximation de l'opérateur

$$e^{i h^{-1} t P_k(h)} b_{qk}^w(y, z, h^2 D_y, h D_z) e_{q,+}(z, \lambda, \omega, h)$$

agissant sur  $L^2(\mathbb{R}_y)$  par un opérateur pseudodifférentiel  $\tau_{k,q,l}(t, y, z, h^2 D_y)$  dont le symbole appartient à la classe limite  $S_{\frac{1}{2}}(\mathbb{R}_{y,\eta}^2, h^2)$ . Pour  $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}_y)$  on cherche une solution  $\psi(t) \in L^2(\mathbb{R}_{y,z}^{n-1})$  de l'équation

$$\begin{cases} (i h \partial_t - P_k(h)) \psi = 0 \\ \psi|_{t=0} = b_{kq}^w(y, z, h^2 D_y, h D_z) e_{q,+}(z, \lambda, \omega, h) \varphi(y). \end{cases}$$

sous la forme  $\tau_{q,k,l}^w(t, y, z, h^2 D_y, h) \varphi$  avec

$$\tau_{q,k,l}(t, y, z, \eta, h) = \sum_{j \geq 0} h^j \tau_{q,k,l,j}(t, y, z, \eta) e^{i h^{-1} S_{q,k,l}(t, y, z, \eta)}$$

et  $\tau_{q,k,l,j}(t, \cdot), S_{q,k,l}(t, \cdot) \in S(\mathbb{R}_{y,z,\eta}^n, h^2)$ . En faisant un peu de calcul symbolique dans la classe  $S(\mathbb{R}_{y,\eta}^2, \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}_z^{n-2})), h^2) \times S_{\frac{1}{2}}(\mathbb{R}_{y,\eta}^2, \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}_z^{n-2})), h^2)$ , on calcule les symboles  $\tau_{q,k,l,j}$ .

On reporte ensuite l'expression de  $\tau_{k,q,l}(t, y, z, h^2 D_y)$  dans (1.3.63) et on conclut par une méthode de phase stationnaire assez proche de celle de [RT89].





## Chapitre 2

# Sur l'équation de Schrödinger non-linéaire avec champ magnétique

Dans cette partie on décrit les résultats obtenus dans [Mic08] sur le problème de Cauchy pour l'équation de Schrödinger non-linéaire avec champ magnétique. On se place sur  $\mathbb{R}^n$  avec  $n \geq 1$  et on considère l'équation

$$i\partial_t u = H_{A(t)} u - b^\gamma f(x, u) \quad (2.0.1)$$

avec conditions initiales

$$u|_{t=t_0} = \varphi. \quad (2.0.2)$$

Ici

$$H_{A(t)} = \sum_{j=1}^n (i\partial_{x_j} - bA_j(t, x))^2, t \in \mathbb{R}, x \in \mathbb{R}^n$$

est l'opérateur de Schrödinger dépendant du temps associé au potentiel magnétique  $A(t, x) = (A_1(t, x), \dots, A_n(t, x))$ ,  $b \in ]0, +\infty[$  est un paramètre quantifiant l'intensité du champ magnétique et  $\gamma \geq 0$ . Les hypothèses faites sur le champ magnétique sont les suivantes.

**Hypothèse 1** *On suppose que la fonction  $(t, x) \mapsto A(t, x)$  est régulière et qu'elle satisfait les estimations suivantes :*

$$\begin{aligned} \forall \alpha \in \mathbb{N}^n \quad \sup_{(t,x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n} |\partial_x^\alpha \partial_t A| &\leq C_\alpha \\ \forall |\alpha| \geq 1, \quad \sup_{(t,x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n} |\partial_x^\alpha A| &\leq C_\alpha \\ \exists \epsilon > 0, \forall |\alpha| \geq 1, \quad \sup_{(t,x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n} |\partial_x^\alpha B| &\leq C_\alpha \langle x \rangle^{-1-\epsilon} \end{aligned} \quad (2.0.3)$$

où  $B(t, x)$  désigne la matrice définie par  $B_{jk} = \partial_{x_j} A_k - \partial_{x_k} A_j$

On remarque que les perturbations à support compact de potentiels magnétiques linéaires par rapport à  $x$  satisfont ces hypothèses.

Sous l'hypothèse 1, le domaine de  $H_{A(t)}$  est  $D(H_{A(t)}) = \{u \in L^2(\mathbb{R}_x^n), H_{A(t)} u \in L^2(\mathbb{R}_x^n)\}$ . En particulier, il ne dépend pas de  $t$ . En effet pour tout  $t, t' \in \mathbb{R}$  on a

$$H_{A(t')} = H_{A(t)} + bW(t, t')(i\nabla_x - bA(t)) + b(i\nabla_x - bA(t))W(t, t') + b^2W(t, t')^2 \quad (2.0.4)$$

avec  $W(t, t', x) = \int_t^{t'} \partial_s A(s, x) ds$ . Pour  $t$  et  $t'$  fixés, cette fonction de la variable  $x$  est bornée ainsi que ses dérivées et le contrôle de ces quantités est uniforme par rapport à  $t$  et  $t'$  appartenant à un compact. En fait l'identité précédente montre que l'espace

$$H_{mg}^\beta(\mathbb{R}^n) = \{u \in L^2(\mathbb{R}^n), (1 + H_{A(t)})^{\beta/2} u \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$$

ne dépend pas de  $t \in \mathbb{R}$ . Puisque  $D(H_{A(t)}) = H_{mg}^2(\mathbb{R}^n)$ , il suit immédiatement que le domaine de  $H_{A(t)}$  est indépendant du temps. De plus, les normes naturelles sur cet espace sont équivalentes et on contrôle la dépendance des constantes par rapport aux paramètres. Plus précisément, introduisons la quantité  $m_A = \sup_{(t,x) \in \mathbb{R} \times \mathbb{R}^n} |\partial_t A(t, x)|$  et supposons que  $\beta > 0$  et  $T > 0$  sont fixés. Pour tout  $t, t' \in \mathbb{R}$  vérifiant  $|t - t'| \leq b^{-1}T$  et pour tout  $u \in H_{mg}^\beta$ , il découle de l'équation (2.0.4) et de l'hypothèse 1 que

$$\|(H_{A(t')} + 1)^\beta u\|_{L^2} \leq (1 + 2m_A T + m_A^2 T^2)^\beta \|(H_{A(t)} + 1)^\beta u\|_{L^2}. \quad (2.0.5)$$

Pour  $\beta \in \mathbb{N}$ , on pose

$$\|u\|_{H_{A(t)}^\beta} = \|(i\nabla_x - bA(t))^\beta u\|_{L^2} + \|u\|_{L^2}. \quad (2.0.6)$$

Cette norme est équivalente (uniformément par rapport à  $b$ ) à  $\|(1 + H_{A(t)})^{\beta/2} u\|_{L^2}$ . Au regard de (2.0.5) on définit la norme de Sobolev magnétique par

$$\|u\|_{H_{mg}^\beta} = \|u\|_{H_{A(t_0)}^\beta}.$$

Sous l'hypothèse 1 il est bien connu (voir [Paz83], Th 4.6, p.143 ou [Yaj91]) que pour  $\varphi \in H_{mg}^1$ , l'équation de Schrödinger linéaire

$$i\partial_t u = H_{A(t)} u, \quad u|_{t=s} = \varphi \quad (2.0.7)$$

possède une unique solution  $U_0(t, s)\varphi$ . L'opérateur  $U_0(t, s)$  envoie  $H_{mg}^1$  dans lui même, il est continu de  $L^2$  dans  $L^2$  et de  $H_{mg}^1$  dans  $H_{mg}^1$ . De plus  $U_0(t, s)$  est unitaire sur  $L^2$ .

Le principal résultat obtenu dans [Mic08] concerne la résolution du problème de Cauchy dans l'espace d'énergie pour l'équation de Schrödinger non-linéaire associée. Les hypothèses faites sur la non-linéarité sont les suivantes :

**Hypothèse 2** *On suppose que  $f : \mathbb{R}^n \times \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$  est une fonction mesurable telle que  $f(x, 0) = 0$  presque partout et qu'il existe  $M \geq 0, \alpha \in [0, \frac{4}{n-2}]$ , ( $\alpha \in [0, \infty[$  si  $n = 1, 2$ ) tels que*

$$\begin{aligned} \forall z \in \mathbb{C}, f(x, z) &= (z/|z|)f(x, |z|) \\ \forall z_1, z_2 \in \mathbb{C}, |f(x, z_1) - f(x, z_2)| &\leq M(1 + |z_1|^\alpha + |z_2|^\alpha)|z_1 - z_2| \end{aligned} \quad (2.0.8)$$

pour presque tout  $x \in \mathbb{R}^n$ .

On remarque au passage que ces hypothèses sont fréquentes dans le cas  $A = 0$ . En particulier la seconde hypothèse correspond à une non linéarité sous-critique par rapport à  $H^1$ .

Introduisons maintenant la fonctionnelle d'énergie associée à cette non linéarité. On définit

$$F(x, z) = \int_0^{|z|} f(x, s) ds, \quad G(u) = \int_{\mathbb{R}^n} F(x, u(x)) dx$$

et pour  $t \in \mathbb{R}$  et  $u \in H_{mg}^1$  on définit l'énergie

$$E(b, t, u) = \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{2} |(i\nabla_x - bA(t, x))u(x)|^2 dx - b^\gamma G(u).$$

On voit facilement que l'énergie de toute solution régulière de (2.0.1), (2.0.2), satisfait la loi d'évolution suivante

$$E(b, t, u) = E(b, 0, \varphi) - \operatorname{Re} \int_0^t \langle \partial_s A(s)u(x), (i\nabla - A(s))u(s) \rangle_{L^2} ds.$$

Par suite, l'espace naturel pour résoudre (2.0.1), (2.0.2) semble être  $H_{mg}^1$ .

## 2.1 Sur le problème de Cauchy

**Théorème 2.1.1** *Supposons que les hypothèses 1 et 2 sont satisfaites et que  $\varphi \in H_{mg}^1$ . Alors, il existe  $T_b, T^b > 0$  et un unique  $u \in C([ - T_b, T^b[, H_{mg}^1) \cap C^1([ - T_b, T^b[, H_{mg}^{-1})$  solution de (2.0.1). De plus, ou bien  $T_b = \infty$  (resp.  $T^b = \infty$ ), ou bien  $\lim_{t \rightarrow -T_b} \|u(t)\|_{H_{mg}^1} = \infty$  (resp.  $\lim_{t \rightarrow T^b} \|u(t)\|_{H_{mg}^1} = \infty$ ) et on a*

$$\|u(t)\|_{L^2} = \|\varphi\|_{L^2}, \quad (2.1.1)$$

$$E(b, t, u) = E(b, 0, \varphi) - \operatorname{Re} \int_0^t \langle \partial_s A(s)u(x), (i\nabla - A(s))u(s) \rangle_{L^2} ds, \quad (2.1.2)$$

pour tout  $t \in ] - T_b, T^b[$ . Enfin, il existe  $\delta > 0$  ne dépendant que de  $\alpha, \gamma$  et  $n$  tel que pour tout  $C > 0$ , il existe  $\epsilon > 0$  tel que pour tout  $b \geq 1$  et  $\varphi \in H_{mg}^1$  vérifiant  $\|\varphi\|_{H_{mg}^1} \leq Cb$ , on a  $T_b, T^b \geq \epsilon b^{-\delta}$ .

Le problème de Cauchy pour l'équation de Schrödinger non-linéaire a une longue histoire. En l'absence de champ magnétique, les résultats sont nombreux : voir par exemple [GV79, GV85] et [CW88]. En présence d'un champ magnétique autonome, le comportement du potentiel magnétique  $A(x)$  lorsque  $x$  devient grand joue un rôle important. Lorsque la fonction  $x \mapsto A(x)$  est bornée, les espaces  $H_{mg}^1$  et  $H^1$  coïncident et le problème de Cauchy peut être résolu dans  $H^1$  en utilisant les techniques de point fixe usuelles. Lorsque le potentiel  $A$  n'est pas borné, l'opérateur de multiplication par  $A$  n'est pas continu de  $H^1$  dans  $L^2$  et il est impossible de résoudre le problème de Cauchy dans  $H^1$ .

Pour contourner cette difficulté, certains auteurs travaillent dans l'espace de Sobolev à poids

$$\Sigma = \{u \in H^1(\mathbb{R}^n), (1 + |x|)u \in L^2, \}$$

et montrent que le problème de Cauchy y est bien posé (voir par exemple [DB91], [NS05]). En particulier ils requièrent de la décroissance des données initiales à l'infini. Dans [DB91], cette décroissance est requise car l'auteur utilise des propriétés dispersives du Laplacien plutôt que celle de  $H_A$ . Dans [NS05], l'auteur utilise bien une estimée de Strichartz magnétique mais il procède par une méthode de point fixe qui n'est pas compatible avec le contexte magnétique et nécessite de travailler dans des espaces de fonctions décroissantes à l'infini.

Par ailleurs, il existe un résultat de Cazenave et Esteban [CE88] traitant le cas d'un champ magnétique constant (c'est à dire  $A$  linéaire en  $x$  et indépendant du temps). Ce papier est plus satisfaisant puisqu'il considère le cas de données initiales dans l'espace d'énergie. Néanmoins leur résultat n'est valable que pour des champs magnétiques constants.

On remarquera que lorsque  $A$  n'est pas borné, les espaces  $H^1$ ,  $H_{mg}^1$  et  $\Sigma$  sont différents. Tout d'abord, il est évident que  $\Sigma$  est inclus dans  $H^1 \cap H_{mg}^1$ . Par ailleurs, il est facile de construire des exemples où  $\Sigma$  est strictement inclus dans  $H_{mg}^1$ . Supposons pour cela qu'on est en dimension  $n = 2$  et que le potentiel magnétique est donné par  $A(x, y) = (y, x)$ . Considérons une fonction

$g \in H^1(\mathbb{R}^2)$  telle que  $|x|g \notin L^2$ . Alors un simple calcul montre que  $f(x, y) = g(x, y)e^{-ixy}$  appartient à  $H_{mg}^1 \setminus \Sigma$ .

Une fois le problème de Cauchy résolu localement, il est naturel de se demander si les solutions obtenues sont globales. Dans le cas d'une non-linéarité défocalisante, le Lemme de Gronwall et la loi d'évolution d'énergie (2.1.2) conduisent au résultat suivant.

**Corollaire 2.1.2** *Supposons que  $F(x, z) \leq 0$  pour tout  $x, z$ , alors  $T_b, T^b = +\infty$ .*

Si l'on ne suppose pas que la non linéarité a un signe, on peut étudier l'existence globale de solutions à données initiales petites. Dans [Mic], on étudie le cas d'une non linéarité de type puissance :  $f(x, u) = f(u) = |u|^{2\sigma}u$ ,  $b = 1$ . On a alors le résultat suivant :

**Théorème 2.1.3** *Supposons que  $0 < \sigma < \frac{2}{n}$ , alors l'équation (2.0.1) possède une unique solution  $u$  dans  $C^0(\mathbb{R}, H_{mg}^1) \cap C^1(\mathbb{R}, L^2)$ .*

*Supposons maintenant que  $\sigma = \frac{2}{n}$  et que la fonction  $g(t) = \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |\partial_t A(t, x)|$  appartient à  $L^1(\mathbb{R}_t)$ . Alors, il existe  $r_0 > 0$  tel que pour tout  $\varphi \in H_{mg}^1$  vérifiant  $\|\varphi\|_{L^2} < r_0$ , l'équation (2.0.1) possède une unique solution  $u$  dans  $C^0(\mathbb{R}, H_{mg}^1) \cap C^1(\mathbb{R}, L^2)$ .*

## 2.2 Esquisse de démonstration

Afin d'alléger les notations, on suppose ici  $b = 1$  et on prouve le théorème pour  $t_0 = 0$ .

### 2.2.1 Quelques Lemmes préliminaires

On commence par rappeler l'inégalité diamagnétique

**Lemme 2.2.1** *Soient  $A \in L_{loc}^2(\mathbb{R}^n, \mathbb{R}^n)$  et  $\lambda, \gamma > 0$ . Alors, pour tout  $u \in L^2(\mathbb{R}^n)$  et pour presque tout  $x \in \mathbb{R}^n$ , on a*

$$|(H_A + \lambda)^{-\gamma} u(x)| \leq ((-\Delta + \lambda)^{-\gamma} |u|)(x) \quad (2.2.1)$$

En combinant le Lemme précédent avec les injections de Sobolev usuelles, on montre les injections de Sobolev magnétiques suivantes :

**Lemme 2.2.2** *Soient  $0 < s < \frac{n}{2}$  et  $p_s = \frac{2n}{n-2s}$ , alors  $H_A^s$  s'injecte continûment dans  $L^p(\mathbb{R}^n)$  pour tout  $p \in [2, p_s]$  et il existe  $C > 0$  indépendant de  $A$  tel que*

$$\|u\|_{L^p} \leq C \|u\|_{H_{mg}^s} \quad (2.2.2)$$

*Si  $n = 2$  alors, pour tout  $q > 2$ , l'injection de  $H_{mg}^1$  dans  $L^q$  est continue.*

*Si  $n = 1$  alors  $H_{mg}^1$  s'injecte continûment dans  $L^\infty$  et  $\|u\|_{L^\infty} \leq C \|u\|_{H_{mg}^1}^{\frac{1}{2}} \|u\|_{L^2}^{\frac{1}{2}}$ .*

### 2.2.2 Preuve du Théorème 2.1.1

#### Estimation de Strichartz

La preuve du Théorème 2.1.1 repose sur les estimations de Strichartz prouvées par Yajima [Yaj91] pour le problème

$$i\partial_t u = H_{A(t)} u + g(t), \quad u|_{t=s} = \varphi \quad (2.2.3)$$

**Théorème 2.2.3 (Yajima)** Soit  $I$  un intervalle réel fini,  $(q, r)$  et  $(\gamma_j, \rho_j), j = 1, 2$  des réels tels que  $r, \rho_j \in [2, \frac{2n}{n-2}]$ ,  $\frac{2}{q} = n(\frac{1}{2} - \frac{1}{r})$  et  $\frac{2}{\gamma_j} = n(\frac{1}{2} - \frac{1}{\rho_j})$ . Soit  $g_j \in L^{\gamma_j}(I, L^{\rho_j}(\mathbb{R}_x^n)), j = 1, 2$ , où  $\gamma'_j, \rho'_j$  sont les exposants conjugués de  $\gamma_j, \rho_j$ . Alors, la solution  $u$  de (2.2.3) avec  $g = g_1 + g_2$  vérifie

$$\|u\|_{L^q(I, L^r(\mathbb{R}_x^n))} \leq C(\|g_1\|_{L^{\gamma'_1}(I, L^{\rho'_1}(\mathbb{R}_x^n))} + \|g_2\|_{L^{\gamma'_2}(I, L^{\rho'_2}(\mathbb{R}_x^n))} + \|\varphi\|_{L^2(\mathbb{R}^n)}) \quad (2.2.4)$$

avec une constante  $C$  dépendant uniquement de la longueur de  $I$  et des constantes  $C_\alpha$  de l'hypothèse 1.

*Preuve.* Dans le cas  $g = 0$ , c'est exactement le Théorème 1 de [Yaj91]. Dans le cas général, il suffit de travailler comme dans la Proposition 2.15 de [BGT04] en utilisant le célèbre Lemme de Christ et Kiselev [CK01]. Le fait que la constante  $C$  dépend seulement des  $C_\alpha$  provient des constructions de Yajima [Yaj91].  $\square$

Il est important de remarquer que le Théorème 2.1.1 n'est pas une conséquence immédiate des estimations de Strichartz précédentes. En effet, si on essaye d'appliquer une méthode de point fixe à l'équation (2.0.1), on est confronté à une difficulté majeure lorsqu'on tente de contrôler la norme de la non linéarité dans l'espace  $H_{mg}^1$ . Considérons par exemple le cas où  $f(u) = |u|^2u$ , alors

$$(i\nabla_x - A(t))(|u|^2u) = |u|^2(i\nabla_x - A(t))(u) + ui\nabla_x(|u|^2).$$

Le premier terme du membre de droite est contrôlé par  $\|u\|_{H_{mg}^1}$ . Pour ce qui est du second terme, comme  $A(t, x)$  n'est pas borné par rapport à  $x$ , il est impossible d'obtenir un contrôle de  $i\nabla_x(|u|^2)$  par  $(i\nabla_x - bA(t))(|u|^2)$ .

Pour surmonter cette difficulté, nous avons travaillé comme dans [CW88], [CE88] en approchant la solution de (2.0.1) par les solutions d'une suite d'équations de Schrödinger non-linéaire dont la non-linéarité est linéaire à l'infini. Le principal outil utilisé par Cazenave et Weissler pour justifier leur approximation est une loi de conservation de l'énergie. Ici, le potentiel magnétique dépendant du temps, l'énergie n'est pas conservée. Cependant elle satisfait certaines estimations qui permettent d'appliquer la même stratégie.

Introduisons maintenant les non-linéarités approchées que nous utiliserons par la suite. On pose

$$f_m(x, u) = \mathbb{1}_{|u| < m} f(x, u) + \mathbb{1}_{|u| > m} f(x, m) \frac{u}{m}.$$

Comme dans [CW88], on peut décomposer  $f = \tilde{f}_1 + \tilde{f}_2$  avec

$$\tilde{f}_1(x, z) = \mathbb{1}_{\{|z| \leq 1\}} f(x, z) + \mathbb{1}_{\{|z| \geq 1\}} f(x, 1)z \quad (2.2.5)$$

et

$$\tilde{f}_2(x, z) = \mathbb{1}_{\{|z| \geq 1\}} (f(x, z) - f(x, 1)z). \quad (2.2.6)$$

On a alors  $f_m = \tilde{f}_1 + \tilde{f}_{2,m}$  avec

$$\tilde{f}_{2,m}(x, z) = \mathbb{1}_{\{|z| \leq m\}} \tilde{f}_2(x, z) + \mathbb{1}_{\{|z| \geq m\}} \tilde{f}_2(x, m) \frac{z}{m} \quad (2.2.7)$$

On remarque que toutes ces fonctions satisfont l'hypothèse 2. Les fonctionnelles d'énergie associées à ces non-linéarités sont les suivantes :

$$F_m(x, z) = \int_0^{|z|} f_m(x, s) ds, \quad G_m(u) = \int_{\mathbb{R}^n} F_m(x, u(x)) dx \quad (2.2.8)$$

et pour  $t \in \mathbb{R}$  et  $u \in H_{mg}^1$

$$E_m(b, t, u) = \int_{\mathbb{R}^n} \frac{1}{2} |(i\nabla_x - bA(t, x))u(x)|^2 dx - G_m(u). \quad (2.2.9)$$

Le lemme suivant est crucial pour la démonstration. Sa preuve est très proche de celle de [CW88].

**Lemme 2.2.4** *Soient  $T > 0$  et  $\rho_k, \gamma_k, k = 1, 2$  définis par  $\rho_1 = 2, \rho_2 = \alpha + 2$  et  $\frac{2}{\gamma_k} = n(\frac{1}{2} - \frac{1}{\rho_k})$ . Pour  $M > 0$  il existe une constante  $C(M)$  indépendante du potentiel magnétique  $A$ , telle que pour tout  $u, v \in H_A^1$  vérifiant  $\|u\|_{H_A^1} \leq M$  et  $\|v\|_{H_A^1} \leq M$  on ait*

$$|G(u) - G(v)| + |G_m(u) - G_m(v)| \leq C(M)(\|v - u\|_{L^2} + \|v - u\|_{L^2}^\nu),$$

avec  $\frac{2}{\nu} = \frac{n}{2} - \frac{n}{\alpha+2}$  et pour tout  $u, v \in L^\infty([0, T]H_A^1)$ ,

$$\|\tilde{f}_1(\cdot, u) - \tilde{f}_1(\cdot, v)\|_{L^{\gamma_1'}([0, T], L^{\rho_1'}(\mathbb{R}^n))} \leq C(M)T\|u - v\|_{L^{\gamma_1}([0, T], L^{\rho_1}(\mathbb{R}^n))}.$$

$$\begin{aligned} \|\tilde{f}_{2,m}(\cdot, u) - \tilde{f}_{2,m}(\cdot, v)\|_{L^{\gamma_2'}([0, T], L^{\rho_2'}(\mathbb{R}^n))} + \|\tilde{f}_2(\cdot, u) - \tilde{f}_2(\cdot, v)\|_{L^{\gamma_2}([0, T], L^{\rho_2}(\mathbb{R}^n))} \\ \leq C(M)T^{\frac{\gamma_2-1}{\gamma_2}}\|u - v\|_{L^{\gamma_2}([0, T], L^{\rho_2}(\mathbb{R}^n))} \end{aligned}$$

De plus,  $G_m \rightarrow G$  lorsque  $m \rightarrow \infty$  uniformément sur les ensembles bornés de  $H_A^1$ .

A l'aide de ce Lemme et des estimations de Strichartz, il est assez facile de prouver la partie unicité du Théorème.

**Proposition 2.2.5** *Soient  $T > 0$  et  $u, v \in C([0, T[, H_{mg}^1) \cap C^1([0, T[, H_{mg}^{-1})$  solutions de (2.0.1). Alors  $u = v$ .*

*Preuve.* Soient  $u, v \in C([0, T[, H_{mg}^1) \cap C^1([0, T[, H_{mg}^{-1})$  solutions de (2.0.1), et posons  $w = v - u$ . Alors  $w(0) = 0$  et

$$i\partial_t w - H_{A(t)} w = \tilde{f}_1(u) - \tilde{f}_1(v) + \tilde{f}_2(u) - \tilde{f}_2(v).$$

Soit  $r \in [2, \frac{2}{n-2}]$  et  $q > 2$  tel que  $\frac{2}{q} = n(\frac{1}{2} - \frac{1}{r})$ . On déduit du Théorème 2.2.3 et du Lemme 2.2.4, que

$$\|w\|_{L^q([0, T[, L^r)} \leq C(T + T^{\gamma_2})(\|w\|_{L^\infty([0, T[, L^2)} + \|w\|_{L^{\gamma_2}([0, T[, L^{\rho_2})})$$

où  $\gamma_2 = \frac{\alpha+1}{\alpha+2}$  et  $\frac{2}{\gamma_2} = n(\frac{1}{2} - \frac{1}{\rho_2})$ . On choisit alternativement  $(q, r)$  égal à  $(2, \infty)$  et  $(\gamma_2, \rho_2)$ . En sommant les inégalités obtenues, on peut conclure  $w = 0$  en prenant  $T > 0$  assez petit.  $\square$

## Le cas d'un champ magnétique autonome

On traite dans cette section le cas où le potentiel magnétique  $A$  est indépendant du temps. Dans ces conditions, l'énergie est formellement conservée  $E(u(t)) = E(\varphi)$  et les normes  $\|\cdot\|_{H_{mg}^1}$  et  $\|\cdot\|_{H_A^1}$  coïncident. En suivant la preuve de [CW88], on montre l'existence locale de solutions dans ce cas.

**Proposition 2.2.6** Soient  $M > 0$  et  $A$  un potentiel magnétique indépendant du temps et vérifiant l'hypothèse 1 avec des constantes  $(C_\alpha)_{\alpha \in \mathbb{N}^n}$ . Alors, il existe  $T > 0$  dépendant seulement de  $M$  et des constantes  $(C_\alpha)$  tel que pour tout  $\varphi \in H_A^1$  vérifiant  $\|\varphi\|_{H_A^1} \leq M$ , il existe une unique  $u \in C^0([0, T], H_A^1) \cap C^1([0, T], H_A^{-1})$  solution maximale de

$$i\partial_t u = H_A u + f(x, u)$$

avec condition initiale  $u|_{t=0} = \varphi$ . De plus, pour tout  $t \in [0, T[$  on a

$$E(u(t)) = E(\varphi).$$

et si  $T < \infty$  alors  $\lim_{t \rightarrow T} \|u\|_{H_A^1} = \infty$ .

*Preuve.* On suit le schéma de preuve de [CW88], en insistant sur les points où le caractère autonome de  $A$  joue un rôle.

On commence par regarder le problème de Cauchy

$$i\partial_t u = H_A u + f_m(x, u), \quad u_{t=0} = \varphi \in H_A^1 \quad (2.2.10)$$

où  $f_m$  est définie par (2.2.5), (2.2.6), (2.2.7). En approchant  $\varphi$  par une suite de données initiales appartenant à  $H_A^2$  et en passant à la limite, on montre que pour tout  $\varphi \in H_A^1$ , il existe un temps d'existence  $\tau_{m,A}$  et une fonction  $u_m \in C([0, \tau_{m,A}], H_A^1) \cap C^1([0, \tau_{m,A}], H_A^{-1})$  solution de (2.2.10). De plus, pour tout  $t \in [0, \tau_{m,A}[$ , on a

$$E_m(u_m(t)) = E_m(\varphi) \quad (2.2.11)$$

et

$$\|u_m(t)\|_{L^2} = \|\varphi\|_{L^2}. \quad (2.2.12)$$

Le point clef de la preuve est la résolution du problème de Cauchy dans  $H_A^2$  et le passage à la limite. Ceci utilise fortement le fait que  $A$  est indépendant du temps.

On montre ensuite que le temps d'existence  $\tau_{m,A}$  peut être minoré uniformément dès lors que la donnée initiale est dans un ensemble borné de  $H_A^1$ . Plus précisément, pour tout  $M > 0$ , il existe  $T_1 > 0$  dépendant seulement de  $M$  et des constantes  $C_\alpha$  de l'hypothèse 1 tel que pour tout  $\varphi \in H_A^1$  vérifiant  $\|\varphi\|_{H_A^1} \leq M$ , on ait

$$\|u_m\|_{L^\infty([0, T_1], H_A^1)} \leq 2\|\varphi\|_{H_A^1}. \quad (2.2.13)$$

Ici, le point crucial de la preuve est la conservation de l'énergie.

En utilisant les estimations de Strichartz et le Lemme 2.2.4, on montre ensuite qu'il existe  $T_2 > 0$  tel que la suite  $(u_m)_{m \in \mathbb{N}}$  est de Cauchy dans  $C([0, T_2], L^2)$ . On note  $u$  la limite de  $u_m$ . En utilisant l'estimation (2.2.13) et la conservation de l'énergie, on montre facilement que  $u$  appartient à  $C([0, T_2], H_A^1) \cap C^1([0, T_2], H_A^{-1})$  et qu'elle est solution de (2.0.1).  $\square$

## Le cas général

On considère maintenant le cas où le potentiel magnétique peut dépendre du temps. A nouveau, on considère le problème de Cauchy approché

$$i\partial_t u = H_{A(t)} u + f_m(x, u), \quad u_{t=0} = \varphi. \quad (2.2.14)$$

Formellement, l'énergie des solutions de cette équation vérifie la loi d'évolution suivante :

$$E_m(t, u) = E_m(0, \varphi) - \operatorname{Re} \int_0^t \langle \partial_s A(s)u(s), (i\nabla_x - A(s))u(s) \rangle ds. \quad (2.2.15)$$

Cette loi remplacera la conservation de l'énergie dans notre approche. Le problème principal que l'on rencontre est le suivant. On a vu que la résolution du problème de Cauchy approché dans  $H_A^2$  était cruciale dans le cas autonome. Or les arguments utilisés ne s'appliquent pas au cas dépendant du temps. En effet, le point clef dans l'approche de [CW88] est que pour tout  $g \in C([0, T], H^1)$  Lipschitz par rapport au temps, la fonction  $v(t) = \int_0^t U_0(t, s)g(s)ds$  est aussi de classe Lipschitz (ici  $U_0(t, s)\varphi$  désigne la solution  $u$  de  $i\partial_t u = H_{A(t)}u(t)$  telle que  $u(s) = \varphi$ ). Ceci se montre facilement en utilisant l'identité  $U_0(t+h, s) = U_0(t, s-h)$  qui permet d'utiliser les hypothèses faites sur  $g$ . Lorsque  $A$  dépend du temps, cette approche ne fonctionne plus et l'on prouve l'existence de solution dans  $H_{mg}^1$  directement.

**Proposition 2.2.7** *Soit  $\varphi \in H_{mg}^1$ , alors il existe  $\tilde{T} > 0$  et  $u_m \in C([0, \tilde{T}[, H_{mg}^1) \cap C^1([0, \tilde{T}[, H_{mg}^{-1})$  solution de (2.2.14). De plus, pour tout  $t \in [0, \tilde{T}[$ , on a*

$$E_m(t, u_m) = E_m(t, \varphi) - \operatorname{Re} \int_0^t \langle \partial_s A(s)u(s), (i\nabla_x - A(s))u(s) \rangle ds. \quad (2.2.16)$$

et

$$\|u_m(t)\|_{L^2} = \|\varphi\|_{L^2}. \quad (2.2.17)$$

*Preuve.* La preuve consiste à approcher le potentiel magnétique  $A(t, x)$  par une suite de potentiels  $A_n(t, x)$  qui sont constants par morceaux par rapport au temps. Au regard de l'hypothèse 1 et de la proposition 2.2.6, quelque soit  $M > 0$ , il existe  $T_2 = T_2(M) > 0$  tel que pour tout  $t_0 \in [0, T_2]$  le problème de Cauchy

$$i\partial_t u = H_{A(t_0)} u(t) + f_m(u(t)), \quad u|_{t=t_0} = \varphi$$

peut être résolu dans  $C([t_0, t_0 + T_2[, H_{A(t_0)}^1)$  pour toute donnée initiale telle que  $\|\varphi\|_{H_{A(t_0)}^1} \leq M$ .

On se donne une donnée initiale  $\varphi \in H_{mg}^1$  telle que  $\|\varphi\|_{H_{A(0)}^1} \leq \frac{M}{4}$  et  $T \in ]0, T_2]$ . Pour  $n \in \mathbb{N}^*$ ,  $k \in \{0, \dots, n\}$  on pose  $t_n^k = \frac{kT}{n}$  on définit

$$A_n(t, x) = \sum_{k=0}^n 1_{[t_n^k, t_n^{k+1}[}(t) A(t_n^k, x), \quad \forall t \in [0, T]$$

On définit alors l'Hamiltonien  $H_n = (i\nabla_x - A_n)^2$  et l'on cherche des solutions  $u_{n,m}$  de

$$i\partial_t u = H_n u + f_m(u), \quad u|_{t=0} = \varphi. \quad (2.2.18)$$

En utilisant l'analyse menée dans le cas autonome, on montre qu'une telle solution est donnée par

$$u_{n,m}(t, x) = \sum_{k=0}^{n-1} 1_{[t_n^k, t_n^{k+1}[}(t) v_{k,n,m}(t, x), \quad (2.2.19)$$

où les fonctions  $v_{k,n,m}(t, x)$  sont définies de la manière suivante. On choisit  $v_{0,n,m}$  comme étant la solution de

$$\begin{cases} i\partial_t v_{0,n,m} = (i\nabla_x - A(t_n^0, x))^2 v_{0,n,m} + f_m(v_{0,n,m}) \\ v_{0,n,m}(t_n^0, x) = \varphi(x) \end{cases} \quad (2.2.20)$$



et pour  $k \geq 1$ ,  $v_{k,n,m}(t, x)$  est la solution de

$$\begin{cases} i\partial_t v_{k,n,m} = (i\nabla_x - A(t_n^k, x))^2 v_{k,n,m} + f_m(v_{k,n,m}) \\ v_{k,n,m}(t_n^k, x) = v_{k-1,n,m}(t_n^k, x). \end{cases} \quad (2.2.21)$$

Pour  $w \in H_{mg}^1(\mathbb{R}^n)$  on définit l'énergie

$$E_{n,m}(t, w) = \frac{1}{2} \int_{\mathbb{R}^n} |(i\nabla_x - A_n(t, x))w(x)|^2 dx + G_m(w).$$

En écrivant la conservation de l'énergie sur chaque intervalle  $[t_n^k, t_n^{k+1}[$  et en utilisant le fait que  $\partial_t A(x, t)$  est borné uniformément, on montre que pour tout  $t \in [t_n^{k_0}, t_n^{k_0+1}[$

$$\begin{aligned} E_{n,m}(t, u_{n,m}(t)) &= E_{n,m}(0, \varphi) \\ &- \sum_{k=1}^{k_0} \int_{t_n^{k-1}}^{t_n^k} \operatorname{Re} \langle (i\nabla_x - A(t_n^{k-1}))u_{n,m}(t_n^k), \partial_s A(s, x)u_{n,m}(t_n^k) \rangle ds \\ &+ O\left(\frac{1}{n} \|\varphi\|_{L^2}^2\right). \end{aligned} \quad (2.2.22)$$

En utilisant cette loi d'évolution de l'énergie et le Lemme 2.2.4, on montre que la suite de fonctions  $(u_{n,m})_{n \in \mathbb{N}}$  est bornée dans  $H_{mg}^1$  uniformément par rapport à  $m$ . En utilisant cette borne et les estimations de Strichartz, on montre que la suite  $(u_{n,m})_{n \in \mathbb{N}}$  est de Cauchy dans  $L^\infty([0, \tilde{T}], L^2(\mathbb{R}^n))$  et que sa limite  $u_m$  est solution de (2.2.14). En passant à la limite dans (2.2.22) et en utilisant la semicontinuité inférieure de la norme de Sobolev magnétique, on montre que  $u_m$  est dans  $H_{mg}^1$  et qu'elle vérifie

$$E_m(t, u_m) \leq E_m(0, \varphi) - \operatorname{Re} \int_0^t \langle \partial_s A(s)u(s), (i\nabla_x - A(s))u(s) \rangle ds. \quad (2.2.23)$$

En inversant le sens du temps et en refaisant le même raisonnement, on montre l'inégalité inverse de (2.2.23).  $\square$

Une fois que l'on dispose de solutions  $H_{mg}^1$  du problème (2.2.14), on peut appliquer la stratégie générale de [CW88] et faire tendre le paramètre  $m$  vers l'infini pour obtenir une solution de (2.0.1).

### 2.2.3 Preuve du Théorème 2.1.3

On détaille ici la preuve dans le cas  $n \geq 3$ . Si  $n = 1$  ou  $2$ , la preuve est similaire. Il suffit d'utiliser les injections de Sobolev magnétiques ad hoc (cf Lemme 2.2.2).

Supposons donc que  $n \geq 3$ , alors  $s = 1 < \frac{n}{2}$  et on déduit du Lemme 2.2.2 que  $H_{mg}^1$  s'injecte continûment dans  $L^{\frac{2n}{n-2}}$  :

$$\|u\|_{L^{\frac{2n}{n-2}}} \leq C \|u\|_{H_{mg}^1}. \quad (2.2.24)$$

Supposons par l'absurde que  $T^*$  est fini. Alors, la solution  $u$  de (2.0.1) vérifie  $\lim_{t \rightarrow T^*} \|u\|_{H_{mg}^1} = +\infty$ . Par ailleurs, sa norme  $L^2$  est constante  $\|u(t)\|_{L^2} = \|\varphi\|_{L^2} := d_0$  et son énergie vérifie la loi d'évolution suivante :

$$|E(t, u)| \leq E_0 + \int_0^t |\partial_s A| \|u\|_{L^2} \|\nabla_{A(s)} u\|_{L^2} ds \quad (2.2.25)$$

Comme  $E(t, u(t)) = \frac{1}{2} \|\nabla_{A(t)} u\|_{L^2}^2 - G(u)$  on en déduit que

$$\frac{1}{2} \|\nabla_{A(t)} u\|_{L^2}^2 \leq E_0 + G(u) + \int_0^t |\partial_s A| \|u\|_{L^2} \|\nabla_{A(s)} u\|_{L^2} ds \quad (2.2.26)$$

Par ailleurs, on déduit de l'inégalité de Hölder et de (2.2.24) que pour  $\sigma < \frac{2}{n-2}$ , on a

$$G(u) \leq C \|u\|_{H_{mg}^1}^{n\sigma} \|u\|_{L^2}^{2+(2-n)\sigma} \leq C(T^*) (\|\nabla_{A(t)} u\|_{L^2}^2 + d_0)^{\frac{n\sigma}{2}} d_0^{(2-n)\sigma} \quad (2.2.27)$$

En combinant les inégalités (2.2.26) et (2.2.27), il vient

$$\frac{1}{2} \|\nabla_{A(t)} u\|_{L^2}^2 \leq C(T^*) (\|\nabla_{A(t)} u\|_{L^2}^2 + d_0^2)^{n\sigma/2} d_0^{2+(2-n)\sigma} + d_0 \int_0^t \|\nabla_{A(s)} u\|_{L^2} ds \quad (2.2.28)$$

Si  $\sigma < \frac{2}{n}$ , ceci implique que  $\|\nabla_{A(t)} u\|_{L^2}$  reste borné lorsque  $t$  tend vers  $T^*$  ce qui est absurde.

Supposons maintenant que  $\sigma = \frac{2}{n}$  et que la fonction  $g(t) = \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |\partial_t A(t, x)|$  appartient à  $L^1(\mathbb{R}_t)$ . Il est facile de voir qu'il existe des constantes  $C_1, C_2 > 0$  dépendant seulement de  $\|g\|_{L^1(\mathbb{R})}$  telles que pour tout  $t, t' \in \mathbb{R}$ , on ait

$$C_1 \|(\mathbf{H}_{A(t)} + 1)^\beta u\|_{L^2} \leq \|(\mathbf{H}_{A(t')} + 1)^\beta u\|_{L^2} \leq C_2 \|(\mathbf{H}_{A(t')} + 1)^\beta u\|_{L^2} \quad (2.2.29)$$

Par suite, l'inégalité (2.2.28) est satisfaite avec une constante  $C_0 = C(T^*)$  indépendante de  $T^*$ . Comme  $\sigma = \frac{2}{n}$ , ceci entraîne

$$\left(\frac{1}{2} - C_0 d_0^{\frac{4}{n}}\right) \|\nabla_{A(t)} u\|_{L^2}^2 \leq C_0 (d_0^{\frac{4}{n}} + d_0 \|\nabla_{A(t)} u\|_{L^2}) \quad (2.2.30)$$

En prenant  $r_0 = (2C_0)^{-\frac{n}{4}}$  et en supposant  $d_0 := \|\varphi\|_{L^2} < r_0$ , l'inégalité ci-dessus montre que  $\|\nabla_{A(t)} u\|_{L^2}$  reste borné pour tout temps, ce qui est absurde.

### 2.3 Approximation WKB dans la limite $b \rightarrow \infty$

On s'intéresse ici aux solutions de l'équation

$$\begin{cases} i\partial_s u = \mathbf{H}_{A(s)} u + b^2 u g(|u|^2) \\ u|_{s=0} = a_0(x) e^{ibS(x)} \end{cases} \quad (2.3.1)$$

avec une non-linéarité  $g$  indépendante de  $x$ . Avec les notations de la section précédente, ceci correspond à  $f = ug(|u|^2)$ . On suppose à nouveau que  $f$  vérifie l'hypothèse 2 et on demande en plus que l'hypothèse suivante soit vérifiée

**Hypothèse 3**  $g \in C^\infty(\mathbb{R}_+, \mathbb{R})$  et  $g' > 0$ .

Sous l'hypothèse que  $a_0 \in H^1$  et  $\nabla S + A(0) \in L^2$ , la donnée initiale vérifie  $\|a_0(x) e^{ibS(x)}\|_{H_{mg}^1} = O(b)$ . Par conséquent, sous les hypothèses 1, 2 et 3 on déduit du Théorème 2.1.1 qu'il existe une unique solution de (2.3.1) dans  $C(-T_b, T^b], H_{mg}^1$  avec  $T_b, T^b \geq Cb^{-\delta}, \delta > 0$ .

Le principal résultat de cette section est le suivant.

**Théorème 2.3.1** *Soit  $\sigma > \frac{n}{2} + 2$ . Supposons que les hypothèses 1, 2 et 3 sont satisfaites. Supposons aussi que  $\partial_t A$  appartient à  $H^{\sigma-1}(\mathbb{R}^n)$  pour tout  $t \in \mathbb{R}$  et soit  $a_0 \in H^\sigma(\mathbb{R}^n)$  et  $S$  tel que  $\nabla S + A(t=0)$  appartient à  $H^{\sigma-1}(\mathbb{R}^n)$ . Alors, il existe  $T > 0$  et  $\alpha_b, \phi_b$  appartenant à  $\mathcal{H}_\sigma = C([0, T], H^\sigma(\mathbb{R}^n)) \cap C^1([0, T], H^{\sigma-1}(\mathbb{R}^n))$  tels que  $u(t, x) = \alpha_b(bt, x) e^{ib(S(x) + \phi_b(bt, x))}$  est solution de (2.3.1) sur  $[0, b^{-1}T]$ . De plus,  $\alpha_b, \phi_b$  sont bornées dans  $\mathcal{H}_\sigma$  uniformément par rapport à  $b$ .*

*Preuve.* Posons  $h = b^{-1} > 0$  et  $u(s) = v(bs)$ . Alors, l'équation (2.3.1) est équivalente à

$$\begin{cases} ih\partial_t v = (ih\nabla_x - A(ht))^2 v + vg(|v(t)|^2) \\ v|_{t=0} = a_0(x)e^{ih^{-1}S(x)} \end{cases} \quad (2.3.2)$$

Suivant une idée de Grenier [Gre98], on cherche  $v$  sous la forme  $v(t, x) = \alpha_h(t, x)e^{ih^{-1}\phi_h(t, x)}$ . L'équation (2.3.2) devient

$$\begin{cases} \partial_t \phi_h + |G_A \phi_h|^2 + g(|\alpha_h|)^2 = 0 \\ \partial_t \alpha_h + G_A \phi_h \cdot \nabla \alpha_h + \operatorname{div}(G_A \phi_h) \alpha_h = ih\Delta \alpha_h \end{cases} \quad (2.3.3)$$

où  $G_A \phi = (\nabla_x \phi + A(ht))$ . En posant  $\varphi_h(t, x) = G_A \phi_h(t, x) \in \mathbb{R}^n$  et en séparant partie réelle et partie imaginaire  $\alpha_h = \alpha_{1,h} + i\alpha_{2,h}$ , on abouti au système

$$\partial_t w_h + \sum_{j=1}^n A_j(w_h) \partial_{x_j} w_h = hLw_h + \nu_h \quad (2.3.4)$$

avec

$$w_h = \begin{pmatrix} \alpha_{1,h} \\ \alpha_{2,h} \\ \varphi_{1,h} \\ \vdots \\ \varphi_{n,h} \end{pmatrix}, \nu_h = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ h\partial_t A_1(ht, x) \\ \vdots \\ h\partial_t A_n(ht, x) \end{pmatrix} \quad (2.3.5)$$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta & 0 \\ \Delta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0_{n \times n} \end{pmatrix} \quad (2.3.6)$$

et

$$A_j(w) = \begin{pmatrix} \varphi_{j,h} & 0 & \alpha_1 & \dots & \alpha_1 \\ 0 & \varphi_{j,h} & \alpha_2 & \dots & \alpha_2 \\ 2g'\alpha_1 & 2g'\alpha_2 & v_j & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 2g'\alpha_1 & 2g'\alpha_2 & 0 & 0 & \varphi_{j,h} \end{pmatrix} \quad (2.3.7)$$

Le point clef de l'analyse est alors l'existence (grâce à l'hypothèse 3) d'un symétriseur

$$S = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & \frac{1}{g'} I_n \end{pmatrix} \quad (2.3.8)$$

qui est symétrique et positif. Ceci permet de prouver l'existence de  $\phi_h$  et  $\alpha_h \in H^\sigma$  solutions de (2.3.3). On renvoie à [Mic08] pour les détails. □

Comme corollaire quasi-immédiat de ce théorème on démontre aussi dans [Mic08], le résultat d'instabilité suivant :

**Proposition 2.3.2** *Soit  $\sigma > \frac{n}{2} + 2$  et  $A$  vérifiant les hypothèses du Théorème 2.3.1. Supposons que  $S$  est telle que  $\nabla S + A(t=0)$  appartient à  $H^{\sigma-1}(\mathbb{R}^n)$ . Alors, il existe  $a_0$  et  $\tilde{a}_{0,b}$  appartenant à  $H^\sigma(\mathbb{R}^n)$  et  $0 < t_b < Cb^{-1}$  tels que*

$$\|a_0 - \tilde{a}_{0,b}\|_{L^2} \rightarrow 0 \text{ quand } b \rightarrow \infty$$

et les solutions  $u_b$  (resp.  $\tilde{u}_b$ ) associées à (2.3.1) avec donnée initiale  $a_0 e^{ibS(x)}$  (resp.  $\tilde{a}_0 e^{ibS(x)}$ ) vérifient

$$\|u_b - \tilde{u}_b\|_{L^\infty([0,t_b],L^2)} \geq 1.$$

Troisième partie

Sur les opérateurs de marche  
aléatoire



Le calcul numérique effectif est un problème qui se pose fréquemment dans divers domaines des sciences (Physique, Biologie, Médecine, etc.). Dans bien des situations, les méthodes déterministes de calcul sont mises en défaut et on a recours à des méthodes probabilistes dites de Monte-Carlo. Supposons par exemple que  $f$  est une fonction continue sur un intervalle borné  $[a, b]$  et que  $0 \leq f \leq 1$ . Si la fonction  $f$  varie très vite, les méthodes de discrétisation de l'intervalle  $[a, b]$  pour calculer numériquement l'intégrale de  $f$  demanderont un très grand nombre de pas. Si ce nombre est trop grand, la méthode devient inopérante pour des raisons de temps de calcul. Une approche probabiliste (qui est le fondement de la théorie de la mesure) consiste à découper  $[0, 1]$  en petits morceaux  $[a_k, a_{k+1}]$  et à approcher l'intégrale de  $f$  par

$$\sum_{k=0}^N p_k a_k,$$

où  $p_k/(b-a)$  est la probabilité que  $f(x)$  appartienne à  $[a_k, a_{k+1}]$ . Le nombre d'intervalles nécessaires pour une bonne approximation étant raisonnable, la méthode est efficace, à condition que l'on soit capable de calculer les probabilités  $p_k$ . En d'autres termes, le problème initial du calcul numérique de l'intégrale de  $f$  se ramène au problème suivant : déterminer un algorithme qui permette de tirer au hasard pour la densité  $f$  lorsque celle-ci n'est pas facilement calculable.

L'algorithme de Metropolis, du nom de N. Metropolis, appartient à cette famille et c'est sans doute l'un des algorithmes les plus utilisés. P. Diaconis rapporte souvent l'exemple suivant pour illustrer son efficacité (voir par exemple [Dia09]). Un de ses collègues lui propose de décoder un texte  $\mathcal{T}$  écrit avec des symboles puisés dans un ensemble  $\mathcal{B}$ . Si l'on note  $\mathcal{A}$  l'alphabet latin augmenté des symboles usuels (point, virgule, espace, etc.), il s'agit de déterminer la fonction

$$f : \mathcal{B} \rightarrow \mathcal{A}$$

qui donnera un sens au message. Une approche très naïve consisterait à tester successivement toutes les fonctions d'encodage  $f$ . Or, en pratique, ces ensembles ont un cardinal élevé (de l'ordre de 40 symboles pour écrire en français). Par conséquent, l'ensemble des fonctions d'encodage contient  $40!$  éléments (en supposant pour simplifier que  $\mathcal{A}$  et  $\mathcal{B}$  ont même cardinal). La simple énumération de tous ces éléments est donc inaccessible aux ordinateurs.

Il faut donc trouver un algorithme qui en un certain sens favorise les fonctions d'encodage plausibles. Une hypothèse raisonnable, consiste à penser que la fonction  $f$  établit une correspondance entre les ensembles  $\mathcal{B}$  et  $\mathcal{A}$  qui respecte la répartition des lettres dans la langue française. Pour obtenir ces statistiques, on peut partir d'un texte classique et enregistrer pour chaque symboles  $x$  et  $y$ , la proportion  $M(x, y)$  de chaînes  $xy$  dans le texte (si l'on utilise par exemple les 2500 pages d' "À la recherche du temps perdu", à raison de 4000 caractères par page, la collecte des occurrences  $M(x, y)$  nécessitera de l'ordre de  $10^7$  opérations, nombre négligeable par rapport à  $40!$ ). Si on note  $(t_i)_{i \in \{1, \dots, N\}}$  la suite des symboles apparaissant dans le message codé  $\mathcal{T}$ , on introduit alors la plausibilité de  $f$  :

$$Pl(f) = \prod_{i=1}^N M(f(t_i), f(t_{i+1})). \quad (2.3.9)$$

Plus le nombre  $Pl(f)$ , est grand plus le décodeur  $f$  respecte les statistiques de la langue française. On cherche donc une fonction  $f$  qui maximise la plausibilité. Pour cela, on part d'une fonction de codage arbitraire  $f_1$  que l'on va modifier en une fonction  $f_2$  de manière à augmenter sa plausibilité et on itère le procédé. Le choix retenu pour passer de  $f_1$  à  $f_2$ , est donné par l'algorithme de Metropolis qui suit :

- On commence par calculer  $p_1 = Pl(f_1)$ .

- A partir de  $f_1$  on fabrique une fonction  $f_1^*$  en effectuant une transposition aléatoire des valeurs que  $f_1$  attribue à deux symboles.
- On calcule  $p_1^* = Pl(f_1^*)$ . Si  $p_1^* \geq p_1$ , on pose  $f_2 = f_1^*$ .
- Si  $p_1^* < p_1$ , on joue à pile ou face avec probabilité  $p_1^*/p_1$ . Si le résultat est pile, on pose  $f_2 = f_1^*$  et si c'est face on pose  $f_2 = f_1$ .

On itère ensuite le procédé à partir de  $f_2$ .

Bien que l'ensemble de toutes les fonctions possibles soit très grand, cet algorithme converge très rapidement. C'est du moins, ce qu'on peut observer sur des simulations. On renvoie à [Dia09] pour plus de détails.

Un autre exemple très connu est celui du problème des sphères dures. C'est pour traiter ce problème que Metropolis et al [MRR<sup>+</sup>53] ont élaboré leur algorithme. Etant donné un entier  $N \geq 1$  et un réel  $\epsilon > 0$  fixés, on cherche à disposer aléatoirement  $N$  disques de rayon  $\epsilon$  dans une boîte  $\tilde{B} = ] - A - \epsilon, A + \epsilon[$  de manière à ce que les disques ne se recouvrent pas. Ce problème est posé par l'étude de phénomènes de transitions de phases en physique statistique. Dans ce modèle, les disques représentent des atomes et le nombre  $N$  est donc très grand (on renvoie à [Uhl68] pour une description du modèle).

Si on numérote les disques et qu'on note  $x_1, \dots, x_N$  la position de leurs centres respectifs, on cherche donc à tirer au hasard un point  $X = (x_1, \dots, x_N)$  dans l'espace de configuration

$$\mathcal{O}_{N,\epsilon} = \{X \in B^N, \forall i \neq j, |x_i - x_j| > \epsilon\}, \quad (2.3.10)$$

où  $B = ] - A, A[$ . Ici, le terme "hasard" signifie "uniformément par rapport à la mesure de Lebesgue sur  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$ ". Or, la géométrie de cet ouvert étant très compliquée (par exemple, le volume de  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$  est inconnu), la mesure de Lebesgue associée n'est pas directement accessible. Pour dépasser ces difficultés, Metropolis et al [MRR<sup>+</sup>53] ont élaboré un algorithme de type Monte-Carlo. Nous décrivons ici une version semiclassique de cet algorithme qui nécessite la donnée d'un paramètre  $h > 0$ . On part d'une configuration arbitraire  $X^1 = (x_1^1, \dots, x_N^1) \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}$  et on itère le procédé suivant :

- On choisit un des  $N$  disques au hasard, disons le  $k$ ième et on déplace son centre  $x_k^1$  au hasard uniformément dans une boule de rayon  $h$ . On note  $x_k^{1,*}$  sa nouvelle position et  $X^{1,*} = (x_1^1, \dots, x_k^{1,*}, \dots, x_N^1) \in \mathbb{R}^{2N}$  la nouvelle configuration. Si  $X^{1,*} \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}$ , on pose  $X^2 = X^{1,*}$ .
- Si  $X^{1,*} \notin \mathcal{O}_{N,\epsilon}$ , on pose  $X^2 = X^1$  (i.e. on reste au point précédent).

On fabrique ainsi une suite de points  $X^1, \dots, X^n$  et lorsque  $n$  devient grand la répartition des  $X^n$  dans l'ouvert  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$  est uniforme par rapport à la mesure de Lebesgue.

En pratique, le nombre d'étapes nécessaires pour atteindre l'uniformité est raisonnable (au regard du nombre de disques  $N$ ) et cet algorithme est très efficace pour simuler un échantillon représentatif de configurations. On peut alors utiliser cet échantillon pour calculer des quantités physiques (des intégrales) par une méthode de Monte-Carlo.

Dans une série de travaux, nous avons obtenu un contrôle théorique a priori sur le nombre d'étapes nécessaires avant d'atteindre l'uniformité. Tous ces résultats ont été obtenus dans un cadre semiclassique, c'est à dire lorsque le déplacement élémentaire est contrôlé par un petit paramètre  $h$ . On renvoie aux articles [LD07], [DL09], [LM10], [DLM08], [GM10], [CGM10] pour des résultats complets et à [Leb] pour une synthèse dans le cas d'un espace borné. Il existe aussi une très large littérature lorsque l'espace d'état est un ensemble fini de cardinal  $N$ . Dans ce cas, il est très intéressant de relier la vitesse de convergence de l'algorithme à  $N$  (par exemple dans le cas du message codé,  $N = \#A$ ). Pour une introduction à cette problématique ainsi que des références complètes, nous référons à [Dia09], [SC97][DSC98].



## Chapitre 3

# Généralités sur les noyaux de Markov et l'algorithme de Metropolis

### 3.1 Chaînes de Markov sur un espace fini

Soit  $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$  une suite de variables aléatoires sur un espace de probabilités  $(\Omega, \mathcal{F}, P)$  à valeurs dans un espace  $X$ . On dit que  $(X_n)_{n \in \mathbb{N}}$  est une chaîne de Markov si la connaissance de la chaîne au temps  $n$  ne dépend que de sa valeur au temps  $n - 1$ . Autrement dit, pour tout  $n \in \mathbb{N}$  et pour tout  $x_1, \dots, x_n \in X$ , on demande que

$$P(X_n = x_n | X_{n-1} = x_{n-1}, \dots, X_1 = x_1) = P(X_n = x_n | X_{n-1} = x_{n-1}) \quad (3.1.1)$$

où  $P(A|B)$  désigne la probabilité conditionnelle de  $A$  sachant  $B$ . On supposera ici que les chaînes de Markov considérées sont homogènes, c'est à dire que pour tout  $x, y \in X$  la probabilité  $P(X_n = y | X_{n-1} = x)$  est indépendante de  $n$ . On notera  $K(x, y)$  cette quantité.

Si on suppose que l'ensemble  $X$  est fini de cardinal  $m$ , les probabilités de transitions  $(K(x, y))_{x, y \in X}$  définissent une matrice  $m \times m$  à coefficients réels, positifs et tels que pour tout  $x \in X$

$$\sum_{y \in X} K(x, y) = 1 \quad (3.1.2)$$

On notera  $K$  cette matrice.

Supposons donnée une probabilité  $\pi(x)$  sur  $X$ . On dit que  $\pi$  est stationnaire pour  $K$  si quelque soit  $y \in X$  on a

$$\sum_{x \in X} \pi(x) K(x, y) = \pi(y) \quad (3.1.3)$$

Autrement dit, on demande que le vecteur  $(\pi(y))_{y \in X}$  soit un vecteur propre de la matrice  $K^t$  pour la valeur propre 1.

Le théorème fondamental de chaînes de Markov (simple corollaire du théorème de Perron-Frobenius) affirme que sous une simple hypothèse de connectivité, il existe une unique mesure stationnaire et que les itérées  $K^n$  de la matrice de transition convergent vers la distribution stationnaire.

**Théorème 3.1.1** *Supposons qu'il existe  $n_0 \in \mathbb{N}$  tel que  $K^{n_0}(x, y) > 0$  pour tout  $x, y \in X$ . Alors,  $K$  possède une unique distribution stationnaire  $\pi$  et pour tout  $x, y \in X$ , on a  $\lim_{n \rightarrow +\infty} K^n(x, y) = \pi(y)$ .*

Autrement dit, quelque soit le point de départ  $x$ , au bout de  $n$  étapes la chaîne a une probabilité très proche de  $\pi(y)$  d'être en  $y$ , pourvu que  $n$  soit grand. Si l'on cherche à échantillonner  $\pi$  (i.e. à tirer des points au hasard par rapport à  $\pi$ ) et que l'on ne connaît pas  $\pi$ , le théorème précédent affirme qu'une chaîne de Markov pour laquelle  $\pi$  est stationnaire fera l'affaire pourvu qu'on l'ait itérée suffisamment. Un problème naturel consiste donc à trouver une chaîne de Markov calculable pour laquelle  $\pi$  est stationnaire. L'estimation du nombre d'itérations nécessaire pour atteindre l'uniformité est aussi d'un grand intérêt.

## 3.2 Algorithme de Metropolis sur un ensemble fini

On suppose toujours que  $X$  est un ensemble fini et on se donne une probabilité  $\pi$  sur  $X$ . On suppose en outre que **la probabilité  $\pi$  n'est connue qu'à une constante multiplicative près** (en pratique si l'ensemble  $X$  a beaucoup d'éléments le calcul effectif de cette constante peut s'avérer impossible). On cherche à construire une matrice de Markov  $M$  pour laquelle  $\pi$  est stationnaire. Une réponse évidente consiste à prendre  $M(x, y) = \pi(y)$  quelque soit  $x$ . Autrement dit, on choisit une probabilité de transition de  $x$  à  $y$  uniforme et égale à  $\pi(y)$ . En pratique ce choix n'a aucun intérêt : la probabilité  $\pi$  étant inconnue, la matrice  $M$  l'est aussi.

Supposons maintenant qu'on dispose d'une matrice de Markov  $K(x, y)$  (n'ayant a priori aucun lien avec  $\pi$ ), qui soit connue et qui vérifie  $K(x, y) = 0$  ssi  $K(y, x) = 0$ . On va fabriquer à partir de  $K$  une matrice  $M$  pour laquelle  $\pi$  est stationnaire. Pour cela on introduit le taux d'acceptation défini par  $A(x, y) = \pi(y)K(y, x)/\pi(x)K(x, y)$  si  $K(x, y) \neq 0$  et  $A(x, y) = 0$  si  $K(x, y) = 0$ , et on pose :

$$M(x, y) = \begin{cases} K(x, y) & \text{si } x \neq y \text{ et } A(x, y) \geq 1 \\ K(x, y)A(x, y) & \text{si } x \neq y \text{ et } A(x, y) < 1 \\ K(x, y) + \sum_{z|A(x,z)<1} K(x, z)(1 - A(x, z)) & \text{si } x = y \end{cases} \quad (3.2.1)$$

Cette formule a une interprétation simple en terme de chaînes de Markov. Supposons que la chaîne est en  $x$ . Pour déterminer sa position à l'étape suivante, on choisit  $y$  au hasard à l'aide du noyau  $K$ . Si  $A(x, y) \geq 1$ , on bouge en  $y$ . Si  $A(x, y) < 1$ , on accepte ce mouvement avec probabilité  $A(x, y)$  et on reste sur place avec probabilité  $1 - A(x, y)$ . Contrairement à l'exemple trivial discuté au début de ce paragraphe, les coefficients de la matrice  $M$  sont calculables, puisqu'ils ne font intervenir que des quotients  $\pi(x)/\pi(y)$ , quantité dans laquelle la constante de renormalisation inconnue a disparu.

Il est assez facile de voir que la chaîne  $M$  vérifie  $\pi(x)M(x, y) = \pi(y)M(y, x)$  et par conséquent

$$\sum_x \pi(x)M(x, y) = \sum_x \pi(y)M(y, x) = \pi(y) \sum_x M(y, x) = \pi(y). \quad (3.2.2)$$

Autrement dit,  $\pi$  est stationnaire pour  $M$ .

Revenons maintenant à l'exemple de cryptographie discuté précédemment. Dans ce cas,  $X$  est l'ensemble des bijections de  $\mathcal{B}$  dans  $\mathcal{A}$ . Si ces ensembles ont disons 40 éléments, alors  $\#X = 40!$ . La probabilité  $\pi$  est donnée par

$$\pi(f) = z^{-1} \prod_{i=1}^N M(f(t_i), f(t_{i+1})) \quad (3.2.3)$$

où  $z$  est une constante de renormalisation et  $\mathcal{T} = (t_i)_{i=1, \dots, N}$  est le texte codé. En pratique, pour calculer  $z$ , on doit sommer la définition précédente sur toutes les fonctions  $f \in X$ . Or,  $X$  contient tant d'éléments que ce calcul est impossible. Par contre, il est très facile de définir la chaîne de Markov  $K$  qui consiste à fabriquer une fonction  $f^*$  à partir de  $f$  en transposant aléatoirement les valeurs que  $f$  associe à deux symboles. On applique ensuite le procédé de Metropolis à  $K$  et l'on s'aperçoit que le problème du calcul de la constante  $z$  disparaît.

### 3.3 Généralités sur les noyaux de Markov

Soit  $(X, d)$  un espace métrique et  $\mathcal{B}$  la tribu des Boréliens de  $X$ . On note  $L^\infty(X)$  l'espace des fonctions bornées sur  $X$ , muni de la norme  $\|f\|_\infty = \sup_{x \in X} |f(x)|$ .

**Définition 3.3.1** *Un noyau de Markov  $K(x, dy)$  sur  $X$  est une application de  $X$  à valeurs dans les mesures Boréliennes sur  $X$  telle que :*

- pour tout  $x \in X$ ,  $K(x, dy)$  est une mesure de probabilité
- pour tout  $A \in \mathcal{B}$ ,  $x \mapsto K(x, A) = \int_A K(x, dy)$  est une fonction mesurable.

Pour  $f \in L^\infty(X)$  on définit  $K(f)$  par

$$K(f)(x) = \int_X f(y)K(x, dy). \quad (3.3.1)$$

Puisque  $K(x, dy)$  est une mesure de probabilité, la fonction  $K(f)$  appartient à  $L^\infty(X)$  et on a

$$\begin{aligned} K(1) &= 1 \\ f \geq 0 &\implies K(f) \geq 0 \\ \|K(f)\|_\infty &\leq \|f\|_\infty \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

Pour  $n \in \mathbb{N}^*$  et  $x \in X$ , on définit le noyau  $K^n(x, dy)$  par la formule de récurrence

$$K^n(x, A) = \int_X K^{n-1}(y, A)K(x, dy) \quad (3.3.3)$$

pour tout ensemble  $A$  mesurable. On vérifie facilement que  $K^n(x, dy)$  est un noyau de Markov. De plus la formule (3.3.3), montre que  $K^n(x, dy)$  est bien le noyau de l'opérateur  $K^n$ .

Notons  $\mathcal{M}(X)$  l'espace des probabilités sur  $X$ .  $\mathcal{M}(X)$  s'injecte dans le dual des fonctions continues bornées  $C_b^0(X)$  par

$$\langle \pi, f \rangle = \int_X f(x)d\pi(x) \quad (3.3.4)$$

Par suite,  $K^t$  opère sur  $\mathcal{M}(X)$  par

$$\langle K^t(\pi), f \rangle = \langle \pi, K(f) \rangle \quad (3.3.5)$$

**Définition 3.3.2** *Une probabilité  $\pi$  est dite invariante pour  $K$  si  $K^t(\pi) = \pi$ .*

Le théorème suivant est le pendant du théorème 3.1.1 dans le cas continu.

**Théorème 3.3.3** *Supposons que  $X$  est un intervalle compact de  $\mathbb{R}$ . Supposons que le noyau  $K$  vérifie les hypothèses suivantes :*

- $\exists n_0 \in \mathbb{N} \forall x \in X, \forall A$  ouvert,  $K^{n_0}(x, A) > 0$
- Pour toute fonction  $f$  uniformément continue sur  $X$ , la famille  $(K^n(f))_{n \in \mathbb{N}}$  est équicontinue sur  $X$ .

Alors, pour tout  $x \in X$  et  $A \in \mathcal{B}$ , on a  $\lim_{n \rightarrow \infty} K^n(x, A) = \pi(A)$ .

On renvoie à [Fel71] pour la preuve de ce théorème et une exposition générale sur les noyaux de Markov.

Evidemment ce résultat est loin d'être optimal puisqu'il affirme seulement une convergence ponctuelle sans préciser la vitesse à laquelle la convergence a lieu. Par la suite, on travaillera avec la distance de variation totale.

**Définition 3.3.4** Soient  $\mu$  et  $\nu$  deux mesures de probabilité sur  $X$ . Leur distance en variation totale est définie par

$$\|\mu - \nu\|_{TV} = \sup_{A \in \mathcal{B}} |\mu(A) - \nu(A)| = \frac{1}{2} \sup_{f \in L^\infty, \|f\|_\infty \leq 1} \left| \int f d\mu - \int f d\nu \right| \quad (3.3.6)$$

Revenons au cas où  $K(x, dy)$  est un noyau de Markov sur  $X$  admettant une mesure stationnaire  $\pi$ . Notons  $\Pi_0$  le projecteur sur les fonctions constantes  $\Pi_0(f) = \int_X f(x) d\pi(x)$ . La distance de variation totale entre  $K^n(x, dy)$  et la mesure stationnaire est une quantité qui dépend du point de départ  $x$ . Il est donc naturel d'essayer d'estimer cette quantité indépendamment de  $x$ . Il vient de la définition précédente que

$$\sup_{x \in X} \|K^n(x, dy) - \pi\|_{TV} = \frac{1}{2} \|K^n - \Pi_0\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \quad (3.3.7)$$

Nous verrons par la suite, comment des techniques spectrales permettent d'estimer cette quantité. Une difficulté notable vient du fait qu'on doit estimer un opérateur dans  $L^\infty$ , un espace fonctionnel qui n'est pas naturellement associé à la décomposition spectrale des opérateurs.

### 3.4 Opérateurs de marche aléatoire et de Metropolis dans le cas continu

Dans cette section, nous définissons dans un cadre général, la classe d'algorithmes que nous étudions. Ces algorithmes ont été introduits en 1953 par Metropolis et al [MRR<sup>+</sup>53] pour mettre en oeuvre des procédés d'échantillonnage pour des problèmes de transitions de phase modélisés à travers le problème des sphères dures. De nombreuses généralisations ont été développées depuis. Nous décrivons ici un algorithme de Metropolis semiclassique associé à une mesure de densité sur un ouvert d'une variété Riemannienne.

On se donne une variété Riemannienne, lisse, sans bord  $(M, g)$ . On note  $d_g(x, y)$  la distance géodésique entre deux points de la variété et  $d_g x$  la forme volume induite par la métrique. On se donne une fonction  $\bar{\theta}$  sur  $M$ . On suppose que  $\bar{\theta}$  est strictement positive, bornée et que la mesure  $d\bar{\pi} = \bar{\theta}(x) d_g x$  est finie sur  $M$ . Pour  $h \in ]0, 1]$ , on note  $B_h(x)$  la boule riemannienne centrée en  $x$  et de rayon  $h$  et on note  $|B_h(x)|$  son volume.

Soit  $\Omega$  un ouvert de  $M$  et  $\theta(x)$  une fonction strictement positive et bornée sur  $\bar{\Omega}$  telle que  $d\pi(x) = \theta(x) d_g x$  est une probabilité sur  $\Omega$ . On considère l'opérateur  $T_h$  défini sur les fonctions continues sur  $\Omega$  par

$$(T_h f)(x) = u_h(x) f(x) + \frac{1}{\bar{\pi}(B_h(x))} \int_\Omega \mathbf{1}_{B_h(x)}(y) f(y) d\bar{\pi}(y) \quad (3.4.1)$$

avec  $u_h(x) = 1 - \frac{\bar{\pi}(B_h(x) \cap \Omega)}{\bar{\pi}(B_h(x))}$ . On remarque que la fonction  $u_h$  est à valeurs dans  $[0, 1]$ . On note  $t_h$  le noyau de  $T_h$ , qui est donné par

$$t_h(x, dy) = u_h(x) \delta_{y=x} + \frac{\mathbf{1}_{\{d_g(x,y) \leq h\}}}{\bar{\pi}(B_h(x))} d\bar{\pi}(y), \quad \forall x \in \Omega \quad (3.4.2)$$

où  $\delta_{y=x}$  est la mesure de Dirac centrée en  $x$  :  $\int_\Omega f(y) \delta_{y=x} = f(x)$  pour toute fonction continue  $f$ .

Par définition, quelque soit  $x \in \Omega$ ,  $t_h(x, dy)$  est une mesure de probabilité sur  $\Omega$ , et par conséquent  $t_h$  est un noyau de Markov. Dans le cas où  $\bar{\theta} = 1$ , c'est le noyau associé à la marche

aléatoire naturelle dans l'ouvert  $\Omega$  définie de la manière suivante : si la marche est au point  $x$ , elle se déplace en un point  $y \in M$  choisi uniformément dans la boule géodésique centrée en  $x$  et de rayon  $h$ . Si le point fabriqué ainsi est encore dans l'ouvert  $\Omega$ , on effectue le mouvement, si par contre il sort de  $\Omega$ , on reste au point  $x$ .

Soit  ${}^tT_h$  l'opérateur transposé de  $T_h$  agissant sur les mesures de Borel sur  $\Omega$ , défini par  $\langle {}^tT_h(\mu), f \rangle = \langle \mu, T_h(f) \rangle$ . Soit  $d\nu_h$  la mesure de probabilité sur  $\Omega$  définie par :

$$d\nu_h = \frac{\bar{\pi}(B_h(x))}{Z_h} d\bar{\pi}(x) \quad (3.4.3)$$

où  $Z_h$  est une constante de normalisation telle que  $d\nu_h(\Omega) = 1$ .

On vérifie facilement que  $T_h$  est auto-adjoint sur  $L^2(\Omega, d\nu_h)$  et admet  $d\nu_h$  pour mesure invariante. Le fait que  $Z_h$  est incalculable en pratique pose a priori un problème. De plus, la mesure que l'on désire réellement échantillonner est  $d\pi$  plutôt que  $d\nu_h$ .

La stratégie de Metropolis consiste à modifier le noyau  $t_h$  de sorte qu'il admette  $d\pi(x) = \theta(x)d_g x$  comme mesure stationnaire. On note  $\rho(x) = \frac{\theta(x)}{\bar{\pi}(B_h(x))}$  pour tout  $x \in \Omega$  et on remarque que les mesures  $\nu_h$  et  $\pi$  sont reliées de la manière suivante :

$$d\pi(x) = p(x)d\nu_h(x) \quad (3.4.4)$$

avec  $p(x) = \frac{Z_h \rho(x)}{\bar{\pi}(B_h(x))}$  (on omet la dépendance de  $p$  par rapport à  $h$  afin d'alléger les notations). On définit le taux d'acceptation  $A(x, y)$  associé à la fonction  $p(x)$  par

$$A(x, y) := \min\left(1, \frac{p(y)}{p(x)}\right) = \min\left(1, \frac{\rho(y)\bar{\pi}(B_h(x))}{\rho(x)\bar{\pi}(B_h(y))}\right). \quad (3.4.5)$$

On remarque au passage que la constante  $Z_h$  inconnue a disparu. Le noyau de Metropolis est alors défini par

$$M_h(x, dy) = w_h(x)\delta_{y=x} + A(x, y)t_h(x, dy) \quad (3.4.6)$$

avec  $w_h(x) = 1 - \int_{\Omega} A(x, y)t_h(x, dy)$ . En terme de marche aléatoire, le noyau précédent se comprend de la manière suivante. Si la marche est au point  $x$ , elle se déplace en un point  $y$  construit grâce au noyau  $t_h(x, dy)$ . Si le point obtenu vérifie  $p(y) \geq p(x)$ , on garde le déplacement. Dans la cas contraire, on effectue le mouvement avec probabilité  $A(x, y)$  et on reste sur place avec probabilité  $1 - A(x, y)$ .

Si on utilise la définition de  $t_h$ , un simple calcul montre que

$$M_h(x, dy) = m_h(x)\delta_{y=x} + K_h(x, dy) \quad (3.4.7)$$

avec

$$K_h(x, dy) = \min\left(\frac{1}{\rho(y)\bar{\pi}(B_h(x))}, \frac{1}{\rho(x)\bar{\pi}(B_h(y))}\right) \mathbb{1}_{\{d_g(x, y) \leq h\}} d\pi(y) \quad (3.4.8)$$

et  $m_h(x) = 1 - \int_{\Omega} K_h(x, dy)$ .

Nous allons consacrer les prochaines sections à l'étude de ces opérateurs. Commençons par énumérer certaines notations qui seront utilisées par la suite. On notera

$$v_h(x) = \bar{\pi}(B_h(x)) \quad (3.4.9)$$

le volume de la boule géodésique centrée en  $x$  et de rayon  $h$  pour la densité  $d\bar{\pi}(x) = \bar{\theta}(x)d_g(x)$ . On introduit aussi l'opérateur  $|\Delta_h^W|$  défini par

$$1 - T_h = \frac{h^2}{2(d+2)} |\Delta_h^W| \quad (3.4.10)$$

C'est clairement un opérateur borné, positif et autoadjoint sur  $L^2(\Omega, d\nu_h)$ . De même, on définit  $|\Delta_h^M|$  par

$$1 - M_h = \frac{h^2}{2(d+2)} |\Delta_h^M|. \quad (3.4.11)$$

On obtient ainsi un opérateur autoadjoint sur  $L^2(\Omega, \rho(x)dx)$ .

On notera  $H^s(\Omega)$  les espaces de Sobolev définis par l'opérateur de Laplace-Beltrami  $-\Delta_g$  sur  $\Omega$ .

Dans tous les cas que nous considérerons, 1 ne sera pas dans le spectre essentiel de  $T_h$ . Par suite, le spectre de  $T_h$  près de 1 sera discret. On notera  $1 = \mu_0(h) < \mu_1(h) \leq \mu_2(h) \leq \dots \leq \mu_k(h) \leq \dots$  la suite décroissante des valeurs propres de  $T_h$  au dessus du spectre essentiel. Dans certains cas, la suite de ces valeurs propres constitue le spectre de  $T_h$ ; dans d'autres cas il existera seulement un nombre fini de valeurs propres au dessus du spectre essentiel. On discutera ces questions par la suite. Par ailleurs, le fait que  $\mu_0(h) = 1$  soit valeur propre simple n'est pas évident a priori. Dans tous les cas que nous regarderons ce sera cependant le cas. On définit donc le trou spectral par  $g(h) = \text{dist}(1, \text{Spec}(T_h) \setminus \{1\}) = 1 - \mu_1(h)$ .

Dans certaines situations, il sera utile d'adopter une caractérisation variationnelle du trou spectral. Pour cela on introduit les fonctionnelles suivantes. La forme de Dirichlet associée à  $T_h$

$$\mathcal{E}_h(f) = \langle (1 - T_h)f, f \rangle_{L^2(\Omega, d\nu_h)} \quad (3.4.12)$$

et la variance

$$\mathcal{V}_h(f) = \|f\|_{L^2(\Omega, d\nu_h)}^2 - \langle f, 1 \rangle_{L^2(\Omega, d\nu_h)}^2. \quad (3.4.13)$$

Le trou spectral est alors la meilleure constante telle que pour tout  $f \in L^2(\Omega, d\nu_h)$ , on ait

$$\mathcal{V}_h(f) \leq \frac{1}{g(h)} \mathcal{E}_h(f) \quad (3.4.14)$$

On remarque enfin qu'un calcul élémentaire utilisant (3.4.2) et (3.4.3) montre que :

$$\mathcal{E}_h(f) = \frac{1}{2Z_h} \int_{\Omega \times \Omega} \mathbb{1}_{d_g(x,y) < h} (f(x) - f(y))^2 d\pi(x) d\pi(y) \quad (3.4.15)$$

et

$$\mathcal{V}_h(f) = \frac{1}{2} \int_{\Omega \times \Omega} (f(x) - f(y))^2 d\nu_h(x) d\nu_h(y) \quad (3.4.16)$$

Nous allons décrire le spectre de  $T_h$  au moyen d'un opérateur limite que nous introduisons maintenant. Soit

$$L_\rho = -\Delta + \frac{\Delta\rho}{\rho}. \quad (3.4.17)$$

C'est un opérateur autoadjoint sur  $L^2(\Omega)$  avec domaine

$$\mathcal{D}(L_\rho) = H^2(M) \quad (3.4.18)$$

si  $\Omega = M$  et

$$\mathcal{D}(L_\rho) = \{u \in H^1(M), \Delta u \in L^2(M) \text{ et } \partial_n u|_{\partial\Omega} = 0\} \quad (3.4.19)$$

si  $\Omega$  est un ouvert relativement compact de  $\mathbb{R}^d$ . Dans tous les cas, on notera  $0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_k \leq \dots$ , la suite croissante des valeurs propres de  $L_\rho$ . Dans certains cas, l'opérateur  $L_\rho$  sera à résolvante compacte et ses valeurs propres constitueront son spectre. Dans d'autres cas, l'opérateur  $L_\rho$  aura du spectre essentiel et certaines de ses valeurs propres seront plongées. On remarque que  $L_\rho$  est en fait un Laplacien de Witten sur les formes de degré 0. L'étude de son spectre a donné lieu à de nombreuses publications en particulier dans le cadre semiclassique  $\rho = e^{-f/h}$  (voir par exemple [HKN04], [HN06], [LPa], [LPb] pour des résultats récents et [Hel02] pour une vue d'ensemble). L'étude d'opérateurs de marche aléatoire pour une densité  $\rho$  de la forme  $e^{-f/h}$  pourrait constituer une piste de recherche intéressante et permettre de fabriquer des exemples de densité pour lesquelles le trou spectral est exponentiellement petit.

Pour  $\lambda \in [0, 1]$  et  $h > 0$ , on introduit la fonction de comptage

$$N(\lambda, h) = \# \text{Spec}(T_h) \cap [1 - \lambda, 1]. \quad (3.4.20)$$

Le volume euclidien de la boule unité dans  $\mathbb{R}^d$  apparaîtra à de nombreuses reprises dans la suite. On le notera  $\alpha_d$ . Un simple calcul en coordonnées polaires montre que

$$\int_{z \in B_{\mathbb{R}^d}(0,1)} z_j^2 dz = \frac{\alpha_d}{d+2} \quad (3.4.21)$$

Enfin, dans toute la suite apparaît la fonction  $G_d : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$  définie par

$$G_d(\xi) = \frac{1}{\alpha_d} \int_{|y| \leq 1} e^{iy\xi} dy \quad (3.4.22)$$

Au facteur  $\frac{1}{\alpha_d}$  près, la fonction  $G_d$  est la transformée de Fourier de la fonction caractéristique de la boule unité dans  $\mathbb{R}^d$ . C'est une fonction radiale et l'on introduit la fonction  $\Gamma_d$  définie sur  $[0, \infty[$  par

$$G_d(\xi) = \Gamma_d(|\xi|^2). \quad (3.4.23)$$

On rassemble dans le lemme suivant quelques propriétés élémentaires des fonctions  $G_d$  et  $\Gamma_d$  que nous utiliserons dans toute la suite.

**Lemme 3.4.1** *La fonction  $G_d$  appartient à la classe de symboles  $S(\langle \xi \rangle^{-\max(1, \frac{d-1}{2})})$ .*

*La fonction  $\Gamma_d$  est analytique et il existe  $\gamma_0 < 1$  tel que  $\Gamma_d(s) \in [-\gamma_0, 1]$  quelque soit  $s$ . De plus, on a  $\lim_{s \rightarrow \infty} \Gamma_d(s) = 0$ ,  $\Gamma_d(s) = 1$  ssi  $s = 0$ , et près de  $s = 0$*

$$\Gamma_d(s) = 1 - \frac{s}{2(d+2)} + \mathcal{O}(s^2) \quad (3.4.24)$$

*Enfin, il existe une fonction analytique  $F_d : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  telle que*

$$1 - \Gamma_d(s) = sF_d(s) \quad (3.4.25)$$

*avec  $F_d(s) > 0$  pour tout  $s \in \mathbb{R}$ .*

Selon que la variété  $M$  est bornée ou ne l'est pas, la nature du spectre de  $T_h$  change substantiellement. Cependant, la stratégie générale d'étude de ces opérateurs reste la même. Nous en esquissons maintenant les grandes lignes.



- 1) On commence par montrer l'existence d'un trou spectral  $g(h)$  en  $O(h^2)$ . Autrement dit, on doit montrer que 1 est valeur propre simple de  $T_h$  et que la seconde valeur propre  $\mu_1(h)$  vérifie  $c_1 h^2 < 1 - \mu_1(h) < c_2 h^2$ . On procède différemment selon la "régularité du problème". Dans les cas peu réguliers, on utilise des méthodes variationnelles qui fournissent une estimation assez grossière de  $g(h)$  (voir les résultats obtenus sur un ouvert Lipschitz [DLM08] ou sur une variété à pointes [CGM10]). Si les données du problème sont suffisamment régulières et permettent l'emploi de méthodes microlocales, on prouve directement une approximation du spectre de  $T_h$  par celui de  $1 - h^2 L_\rho$ , pour ce qui concerne les valeurs propres proches de 1. Dans ce cas, la démonstration passe par l'obtention d'estimations de régularité des fonctions propres de  $T_h$  afin d'obtenir suffisamment de compacité.
- 2) Lorsque le spectre essentiel de  $T_h$  est suffisamment loin de 1, disons  $\sigma_{ess}(T_h) \subset [-1 + \delta_0, 1 - \delta_0]$ , il est légitime et utile pour la suite d'étudier la fonction de comptage  $N(\lambda, h)$  lorsque  $\lambda$  varie dans  $[1 - \delta_0, 1]$ . Dans certains cas, on obtient une asymptotique précise (au premier ordre) de cette fonction. De manière générale, la propriété fondamentale que nous établissons sur cette fonction est l'existence de constantes  $C, q > 0$  telles que

$$N(\lambda, h) \leq C(1 + \lambda h^{-2})^q$$

pour tout  $\lambda \in [1 - \delta_0, 1]$  et  $h > 0$  assez petit.

- 3) Armés des résultats précédents sur le spectre de  $T_h$  et les fonctions propres associées, on peut attaquer le problème de la convergence vers la mesure stationnaire. On commence par remarquer que l'existence d'un trou spectral combinée au théorème spectral montre que

$$\|T_h^n - \Pi_{0,h}\|_{L^2(d\nu_h) \rightarrow L^2(d\nu_h)} \leq (1 - g(h))^n. \quad (3.4.26)$$

où  $\Pi_{0,h}$  est le projecteur orthogonal sur les fonctions constantes dans  $L^2(\Omega, d\nu_h)$ . Combiné avec le fait que  $g(h) \sim Ch^2$ , ceci montre immédiatement que pour la norme  $L^2$ , la convergence vers la mesure stationnaire est en  $e^{-Cnh^2}$ . Si l'on veut obtenir un résultat similaire pour la distance de variation totale, il faut travailler un peu plus. En effet, il s'agit alors d'estimer l'opérateur  $T_h^n - \Pi_{0,h}$  sur  $L^\infty$ . La principale difficulté vient du fait que la borne sur l'opérateur  $T_h$  de  $L^2$  dans  $L^\infty$  est assez mauvaise. L'idée générale consiste alors à utiliser les estimations des fonctions propres ainsi que celle de la fonction de comptage des valeurs propres.

Avant de passer à la description précise de nos résultats, nous aimerions faire quelques commentaires généraux.

Dans presque toutes les situations, la description du trou spectral se fait au moyen de l'opérateur limite  $L_\rho$ . Grosso modo, on montre que  $g(h) \sim h^2 \lambda_1$ , où  $\lambda_1$  est la première valeur propre non nulle de  $L_\rho$ . Ce résultat établit un lien entre deux objets importants, mais en pratique il reporte la difficulté du calcul de  $g(h)$  sur le calcul de  $\lambda_1$ . Si le domaine  $\Omega$  n'est pas élémentaire, le calcul explicite de  $\lambda_1$  est impossible. Pour ce qui est du calcul numérique, dès que l'ouvert  $\Omega$  est compliqué, il devient très difficile de calculer  $\lambda_1$ , en particulier en grande dimension. Il serait donc très intéressant de montrer des bornes a priori sur la constante  $\lambda_1$ , en fonction de la géométrie de l'ouvert et de la dimension de l'espace ambiant.

Pour ce qui concerne la convergence vers l'équilibre, on montrera des estimations du type

$$\|t_h^n(x, dy) - d\nu_h\|_{TV} \leq C e^{-ng(h)}$$

pour une certaine constante  $C$  indépendante de  $h$ . En plus de la difficulté du calcul de  $\lambda_1$  évoquée ci-dessus, il apparaît que la constante  $C$  dépend elle aussi fortement des paramètres du problème. Des estimations précises sur cette constante seraient elle aussi d'un grand intérêt.



Nous allons maintenant détailler les résultats que nous avons obtenus. Dans la prochaine section nous considérons le cas où  $M$  est une variété compacte. On considérera ensuite le cas d'une variété non compacte munie d'une mesure de probabilité.



# Chapitre 4

## Cas d'un espace d'état borné

On décrit dans cette partie des résultats portant sur l'analyse d'opérateurs de type Metropolis lorsque  $\Omega$  est un ouvert d'une variété Riemannienne compacte sans bord. On commence par décrire les résultats obtenus avec G. Lebeau dans le cas où  $\Omega = M$ , [LM10].

### 4.1 Marche aléatoire sur une variété compacte sans bord

Dans cette section, on suppose que  $\Omega = M$  et  $\theta = \bar{\theta} = \frac{1}{\text{Vol}(M)}$ . Pour simplifier les notations on supposera que  $\text{Vol}(M) = 1$ . L'opérateur de marche aléatoire est donc défini par

$$T_h f(x) = \frac{1}{v_h(x)} \int_{d_g(x,y) < h} f(y) d_g y,$$

où  $v_h(x) = |B_h(x)|$  désigne le volume Riemannien de la boule de rayon  $h$  centrée en  $x$ . Il a pour noyau  $t_h(x, dy) = \frac{\mathbb{1}_{d_g(x,y) < h}}{v_h(x)} d_g y$  qui est markovien. La norme de  $T_h$  agissant sur  $L^2(M, d\nu_h)$  est égale à 1 et pour tout  $h > 0$  fixé, la variété  $M$  étant compacte, l'opérateur  $T_h$  est compact. Par conséquent son spectre  $\text{Spec}(T_h)$  est un sous ensemble fermé de  $[-1, 1]$  qui est discret dans  $[-1, 1] \setminus \{0\}$ , avec 0 comme point d'accumulation.

Avant de décrire les résultats obtenus dans [LM10], considérons l'exemple où la variété est le tore plat de dimension  $d$  muni de la métrique euclidienne :  $M = (\mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z})^d$ . Dans ce cas, l'opérateur  $T_h$  et le Laplacien sont très étroitement reliés puisque  $T_h = \Gamma_d(-h^2\Delta_g)$ . En effet sur le tore, le spectre du Laplacien est décrit par la théorie des séries de Fourier. A chaque  $k \in \mathbb{Z}^d$  correspond une fonction propre  $f_k(x) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{i\langle k, x \rangle}$  de  $-\Delta_g$  associée à la valeur propre  $|k|^2 := \sum_{j=1}^d k_j^2$ . De plus, les fonctions  $f_k$ ,  $k \in \mathbb{Z}^d$  forment une base hilbertienne de  $L^2(M)$ . Par conséquent, il suffit de vérifier que  $T_h f_k = \Gamma_d(-h^2\Delta_g) f_k$  pour tout  $k \in \mathbb{Z}^d$ . Comme la métrique est plate, on calcule facilement :

$$\begin{aligned} (2\pi)^{d/2} T_h f_k(x) &= \frac{1}{c_d h^d} \int_{B(x,h)} e^{i\langle k, y \rangle} dy = \frac{e^{i\langle k, x \rangle}}{c_d} \int_{B(0,1)} e^{i\langle hk, u \rangle} du \\ &= \Gamma_d(h^2|k|^2) e^{i\langle k, x \rangle} = (2\pi)^{d/2} \Gamma_d(-h^2\Delta_g) f_k(x) \end{aligned} \tag{4.1.1}$$

Par suite, le spectre de  $T_h$  est entièrement décrit par la fonction  $\Gamma_d$ . Par exemple, on voit très facilement en utilisant le développement limité de  $\Gamma_d$  en 0 que le trou spectral est donné par  $g(T_h) = \frac{h^2}{2(d+2)} + O(h^4)$ .

Dans le cas où la variété n'est pas un espace symétrique et lorsque la métrique n'est pas plate, l'opérateur  $T_h$  n'est plus une fonction du Laplacien. Cependant, il subsiste quelque chose de l'approximation de  $T_h$  par  $\Gamma_d(-h^2\Delta_g)$ .

### 4.1.1 Étude de l'opérateur de marche aléatoire

**Théorème 4.1.1** *Il existe  $\gamma < 1$  tel que pour tout  $h > 0$  assez petit, on a  $\text{Spec}(T_h) \subset [-\gamma, 1]$  et 1 est valeur propre simple de  $T_h$ . De plus pour tout  $L > 0$ , il existe  $h_0 > 0$  et  $C > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et pour tout  $k \leq L$ , on a*

$$\left| \frac{1 - \mu_k(h)}{h^2} - \frac{\lambda_k}{2(d+2)} \right| \leq Ch^2 \quad (4.1.2)$$

*Pour tout  $\delta \in ]0, 1[$ , il existe des constantes  $C_{\delta,i} > 0$  indépendantes de  $h \in ]0, h_0]$ , telles qu'on ait les estimations suivantes : pour tout  $\tau \in [0, (1 - \delta)]$ , la fonction de comptage  $N(\tau, h) = \#\text{Spec}(T_h) \cap [1 - \tau, 1]$  satisfait la loi de Weyl*

$$|N(\tau, h) - (2\pi h)^{-d} \int_{\Gamma_d(|\xi|_x^2) \in [1-\tau, 1]} dx d\xi| \leq C_{\delta,1} (1 + h^{-2}\tau)^{\frac{d-1}{2}} \quad (4.1.3)$$

*où  $dx d\xi$  est la forme volume canonique sur la variété symplectique  $T^*M$ , et  $|\xi|_x$  est la longueur Riemannienne du co-vecteur  $\xi$  au point  $x$ . En particulier, on a*

$$N(\tau, h) \leq C_{\delta,2} (1 + \tau h^{-2})^{d/2} \quad (4.1.4)$$

*De plus toute fonction propre  $e_k^h$  de  $T_h$  associée à une valeur propre  $\mu_k(h) \in [\delta, 1]$  satisfait l'estimation suivante avec  $\tau_k(h) = h^{-2}(1 - \mu_k(h))$*

$$\|e_k^h\|_{L^\infty} \leq C_{\delta,3} (1 + \tau_k(h))^{d/4} \|e_k^h\|_{L^2}. \quad (4.1.5)$$

D'après (4.1.2), les opérateurs  $|\Delta_h^W| = 2(d+2)\frac{1-T_h}{h^2}$  et  $-\Delta_g$  ont des valeurs propres très proches dans tout intervalle  $[0, L]$  indépendant de  $h$ , pour  $h$  assez petit. Le résultat suivant donne une information plus précise sur la différence de leurs résolvantes lorsque  $h$  est petit. Dans le cas présent d'une variété compacte, les espaces  $L^2(M, d\nu_h)$  et  $L^2(M, d_g x)$  sont égaux et leurs normes naturelles respectives sont équivalentes, uniformément par rapport à  $h$ .

Considérons les deux ensembles  $F_1$  et  $F_2$  définis par  $F_1 = \{z \in \mathbb{C}, \text{dist}(z, \text{Spec}(-\Delta_g)) \leq \varepsilon\}$ ,  $F_2 = \{z \in \mathbb{C}, \text{Re}(z) \geq A, |\text{Im}(z)| \leq \varepsilon \text{Re}(z)\}$ , avec  $\varepsilon > 0$  petit et  $A > 0$  grand. Soient  $F = F_1 \cup F_2$  et  $U = \mathbb{C} \setminus F$ . On a le théorème suivant :

**Théorème 4.1.2** *Il existe  $C, h_0 > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$ , et pour tout  $z \in U$*

$$\|(z - |\Delta_h^W|)^{-1} - (z + \Delta_g)^{-1}\|_{L^2 \rightarrow L^2} \leq Ch^2 \quad (4.1.6)$$

Les résultats précédents fournissent des informations assez précises sur l'opérateur  $T_h$ . Toutes ces informations seront utilisées pour étudier la convergence des itérés vers l'équilibre. L'asymptotique de Weyl (4.1.3) et l'estimation de Sobolev (4.1.5) sont à rapprocher des estimations classiques similaires pour le Laplacien sur  $M$ . Pour ce qui est de l'estimation de Weyl, on verra d'ailleurs qu'elle repose sur l'estimation de Weyl classique.

La mesure  $d\nu_h$  étant réversible pour cet opérateur, on peut utiliser le Théorème 4.1.1 pour démontrer la convergence de du noyau  $t_h^n(x, dy)$  vers la mesure stationnaire  $d\nu_h$ . D'un point de vue pratique, la mesure que l'on désire vraiment approcher n'est pas  $\nu_h$  (qui a par exemple le mauvais goût de dépendre de  $h$ ). Afin d'obtenir un noyau de Markov pour lequel la forme volume canonique est stationnaire, on modifie  $t_h(x, dy)$  en suivant la stratégie de Metropolis. Les résultats que nous avons obtenus sont présentés dans la partie suivante.

### 4.1.2 Étude de l'opérateur de Metropolis

On considère le noyau "Metropolisé" de  $t_h$  :

$$M_h(x, dy) = m_h(x)\delta_{y=x} + k_h(x, y)d_g y \quad (4.1.7)$$

où les fonctions  $m_h$  et  $k_h$  sont définies par

$$\begin{aligned} k_h(x, y) &= \min\left(\frac{1}{v_h(y)}, \frac{1}{v_h(x)}\right) \mathbb{1}_{d_g(x, y) < h} d_g y \\ m_h(x) &= 1 - \int_M k_h(x, y)d_g y \end{aligned} \quad (4.1.8)$$

Ainsi défini  $M_h(x, dy)$  est aussi un noyau de Markov. En outre l'opérateur

$$M_h(f)(x) = \int_M f(y)M_h(x, dy) \quad (4.1.9)$$

est auto-adjoint sur l'espace  $L^2(M, d_g x)$ , et par conséquent, on  ${}^t M_h(d_g x) = d_g x$  pour tout  $h$ . Autrement dit, la mesure de probabilité  $d\mu_M = d_g x / \text{Vol}(M)$  est invariante par  $M_h$ .

On peut alors obtenir une description du spectre de  $M_h$  analogue à celle du Théorème 4.1.1.

**Théorème 4.1.3** *Il existe  $\gamma < 1$  tels que le spectre de  $M_h$  est contenu dans  $[-\gamma, 1]$ , 1 est valeur propre simple de  $M_h$ , et le spectre essentiel de  $M_h$  est contenu dans  $[0, Ch^3]$  pour  $h$  assez petit.*

*De plus, si l'on note*

$$Ch^3 < \dots \leq \tilde{\mu}_{k+1}(h) \leq \tilde{\mu}_k(h) \leq \dots \tilde{\mu}_1(h) < \tilde{\mu}_0(h) = 1 \quad (4.1.10)$$

*la suite décroissante des valeurs propres situées au dessus du spectre essentiel de  $M_h$ , alors quelque soit  $L > 0$ , il existe  $h_0 > 0$  et  $C > 0$  tel que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et pour tout  $k \leq L$ , on ait*

$$\left| \frac{1 - \tilde{\mu}_k(h)}{h^2} - \frac{\lambda_k}{2(d+2)} \right| \leq Ch \quad (4.1.11)$$

*Pour  $\delta \in ]0, 1[$  et  $\tau \in ]0, 1 - \delta[$ , le nombre de valeurs propres  $\tilde{N}(\tau, h)$  de  $M_h$  dans l'intervalle  $[1 - \tau, 1]$  vérifie l'estimation de Weyl :*

$$|\tilde{N}(\tau, h) - (2\pi h)^{-d} \int_{\Gamma_d(|\xi|_x^2) \in [1-\tau, 1]} dx d\xi| \leq C_{\delta, 1} (1 + h^{-2}\tau)^{\frac{d-1}{2}} \quad (4.1.12)$$

*Enfin, il existe  $C_\delta$  tel que toute fonction propre  $\tilde{e}_k^h$  de  $M_h$  associée à une valeur propre  $\tilde{\mu}_k(h) \in [\delta, 1]$ , vérifie*

$$\|\tilde{e}_k^h\|_{L^\infty} \leq C_\delta (1 + \tilde{\tau}_k(h))^{d/4} \|\tilde{e}_k^h\|_{L^2} \quad (4.1.13)$$

*avec  $\tilde{\tau}_k(h) = h^{-2}(1 - \tilde{\mu}_k(h))$ .*

La preuve de ce théorème repose sur le fait que  $M_h$  est une petite perturbation de  $T_h$ . Ceci explique que l'asymptotique spectrale (4.1.11) soit moins bonne que dans le Théorème 4.1.1.

A l'aide de ces résultats on peut donner un théorème précisant la vitesse de convergence du noyau  $M_h^n(x, dy)$ , itéré  $n$  fois de  $M_h$ , vers la mesure stationnaire  $d\mu_M$ .

**Théorème 4.1.4** *Il existe  $A > 0$  et  $h_0 > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  on ait les inégalités suivantes :*

$$e^{-\gamma'(h)nh^2} \leq 2 \sup_{x \in M} \|M_h^n(x, dy) - d\mu_M\|_{TV} \leq Ae^{-\gamma(h)nh^2} \quad \text{pour tout } n \quad (4.1.14)$$

*Ici  $\gamma(h)$  et  $\gamma'(h)$  sont deux fonctions positives telles que  $\gamma(h) \simeq \gamma'(h) \simeq \frac{\lambda_1}{2(d+2)}$  quand  $h \rightarrow 0$ .*

### 4.1.3 Esquisses de preuves

L'objet de cette section est de donner quelques idées des preuves des Théorèmes 4.1.1 à 4.1.4. Pour les détails, nous renvoyons à [LM10]. Commençons par l'analyse spectrale de l'opérateur  $T_h$ . La première étape de la démonstration consiste à établir une bonne approximation de  $T_h$  par un opérateur pseudo-différentiel.

#### Structure de l'opérateur

Soit  $U \subset M$  une carte munie de coordonnées locales  $x = (x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d$ . Pour  $x \in U$  et  $r > 0$  petit, la boule géodésique de centre  $x$  et de rayon  $r$  est donnée par

$$B(x, r) = \{x + u, \sum k_{i,j}(x, u)u_i u_j \leq r^2\} \quad (4.1.15)$$

où  $(k_{i,j}(x, u))_{i,j}$  est une matrice symétrique régulière en la variable  $(x, u)$  et telle que  $k_{i,j}(x, 0) = g_{i,j}(x)$ . Pour toute fonction  $f$  à support compact dans  $U$  et pour  $h$  assez petit,  $T_h f$  est supportée dans  $U$  et dans les coordonnées locales, on a

$$T_h f(x) = \frac{1}{|B(x, h)|} \int_{\substack{uk(x, u) \\ u \leq h^2}} f(x + u) \sqrt{\det(g(x + u))} du \quad (4.1.16)$$

En faisant un changement de variable  $hv = w = k^{1/2}(x, u)u$  dans 4.1.16, il vient

$$T_h f(x) = \frac{h^d}{|B(x, h)|} \int_{|v| \leq 1} f(x + hm(x, hv)v) \rho(x, hv) dv \quad (4.1.17)$$

où  $m(x, w)$  est la matrice symétrique définie positive et régulière en  $(x, w)$  telle que près de  $u = 0$  on a  $w = k^{1/2}(x, u)u \Leftrightarrow u = m(x, w)w$ . En particulier,  $m(x, 0) = g^{-1/2}(x)$  et  $\rho(x, w) = \sqrt{\det(g(x + u))} |\det \frac{\partial u}{\partial w}|$  est régulière en  $(x, w)$  et  $\rho(x, 0) = 1$ .

En utilisant la transformée de Fourier semiclassique, on obtient

$$T_h f(x) = Ch^{-d} \int e^{ih^{-1}\langle x-y, \xi \rangle} b(x, \xi, h) f(y) dy \quad (4.1.18)$$

avec

$$b(x, \xi, h) = \frac{h^d}{|B(x, h)|} \int_{|v| \leq 1} e^{ih^{-1}\langle m(x, hv)v, \xi \rangle} \rho(x, hv) dv. \quad (4.1.19)$$

En utilisant la méthode de la phase stationnaire, on donne une approximation du symbole  $b(x, \xi, h)$  :

$$b(x, \xi, h) = e^{i\Phi_+(x, \xi, h)} \tau_+(x, \xi, h) + e^{i\Phi_-(x, \xi, h)} \tau_-(x, \xi, h) + n(x, \xi, h) \quad (4.1.20)$$

où  $n \in S^{-\infty}$ ,  $\tau_{\pm}$  sont deux symboles de degré  $-(d+1)/2$  et les phases  $\phi_{\pm}$  satisfont

$$\Phi_{\pm}(x, \xi, h) = |\xi|_x + O(h) \quad (4.1.21)$$

Ainsi,  $T_h$  est localement la somme de deux transformations canoniques quantifiées avec des symboles de degré  $-(d+1)/2 \leq -1$  et des phases proches de  $(x-y)\xi + h|\xi|_x$ . En particulier, ces opérateurs "gagnent une dérivée semiclassique". On en déduit le premier résultat intermédiaire important :

**Lemme 4.1.5** Soit  $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  égale à 1 près de 0. Il existe  $h_0 > 0, C_0 > 0$  tels que pour tout  $p \in [1, \infty]$ ,  $h \in ]0, h_0]$  et  $s \geq 1$ , on ait

$$\|T_h(1 - \chi)\left(\frac{-h^2\Delta_g}{s}\right)\|_{L^p \rightarrow L^p} \leq \frac{C_0}{\sqrt{s}} \quad (4.1.22)$$

Au regard du lemme précédent, on peut maintenant se concentrer sur l'étude de l'opérateur à basse fréquence. Des calculs en coordonnées locales permettent de montrer le résultat fondamental suivant :

**Lemme 4.1.6** Soit  $h_0$  suffisamment petit et  $\Phi_0 \in C_0^\infty([0, \infty[)$ . Pour  $h \in ]0, h_0]$ , les opérateurs  $T_h\Phi_0(h^2\Delta_g)$  et  $\Phi_0(h^2\Delta_g)T_h$  sont dans la classe  $\mathcal{E}_{cl}^0$ . De plus, l'opérateur  $A_h = h^{-2}(T_h - \Gamma_{d,h})\Phi_0(-h^2\Delta_g)$  appartient à  $\mathcal{E}_{cl}(\langle \xi \rangle^{-\infty})$ . Son symbole principal,  $\sigma_0(A_h)$ , vérifie près de  $\xi = 0$

$$\sigma_0(A_h)(x, \xi) = \left( \frac{S(x)}{3} |\xi|_x^2 (\Gamma_d''(0) - \Gamma_d'(0)^2) + \frac{\Gamma_d''(0)}{3} Ric(x)(\xi, \xi) \right) \Phi_0(|\xi|_x^2) + \mathcal{O}(\xi^3) \quad (4.1.23)$$

où  $Ric(x)$  et  $S(x)$  sont respectivement le tenseur de Ricci et la courbure scalaire au point  $x$ . De plus, étant donnée une carte locale  $U$  et  $a(x, \xi, h) \simeq \sum (h/i)^k a_k(x, \xi) \in S_{cl}^{-\infty}$  un symbole tel que dans cette carte locale  $A_h = Op(a) + R_h$  avec  $R_h$  régularisant, alors pour tout  $k \in \mathbb{N}$  et pour tout  $x \in U$ , on a  $a_k(x, 0) = 0$ .

*Preuve.* La preuve de ce Lemme est un peu technique mais sans surprise. On calcule séparément les symboles des opérateurs  $T_h\Phi_0(h^2\Delta_g)$  et de  $\Gamma_d(-h^2\Delta_g)\Phi_0(h^2\Delta_g)$ . Pour le premier, on se place en coordonnées exponentielles en un point  $x$  et on calcule le symbole à l'origine. Le calcul du second est classique via la formule d'Helffer-Sjöstrand.

Enfin, pour établir les identités  $a_k(x, 0) = 0$  pour tout  $k \in \mathbb{N}$ , on utilise le fait que  $T_h$  est Markovien. Par suite,  $T_h\Phi_0(h^2\Delta_g)(1) = T_h(1) = 1$  et  $\Gamma_d(-h^2\Delta_g)\Phi_0(h^2\Delta_g)(1) = \Gamma_d(0) = 1$  et  $a(x, 0, h) = O(h^\infty)$ .  $\square$

## Estimées des fonctions propres

Un point crucial dans l'étude des opérateurs de marche aléatoire est l'obtention d'estimations a priori des fonctions propres de  $T_h$ . Ces estimations sont utilisées à diverses étapes de l'analyse : développement asymptotique des valeurs propres, preuve des estimations de variations totales, etc. En utilisant les résultats précédents, on montre dans un premier temps des estimations de régularité semiclassique :

**Lemme 4.1.7** Quelque soit  $\delta > 0$  et pour tout  $j \in \mathbb{N}$ , il existe une constante  $C_{\delta,j} > 0$  telle que pour toute fonction propre  $e_k^h$  de  $T_h$  associée à une valeur propre  $\mu_k(h) \in [\delta, 1]$ , on a

$$\|(1 - h^2\Delta_g)^{\frac{j}{2}} e_k^h\|_{L^2(M, d_g x)} \leq C_{\delta,j} \|e_k^h\|_{L^2(M, d_g x)}. \quad (4.1.24)$$

De plus, il existe  $s_\delta > 1$  tel que  $|\Gamma_d(s)| \leq \frac{\delta}{2}$  pour tout  $s \geq s_\delta - 1$  et quelque soit  $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}_+)$  égale à 1 sur  $[0, s_\delta]$  et 0 sur  $[s_\delta + 1, \infty[$ , on ait

$$(1 - \chi)(-h^2\Delta_g)e_k^h = \mathcal{O}_{C^\infty}(h^\infty) \quad (4.1.25)$$

*Preuve.* La preuve de (4.1.24) est une conséquence assez directe du fait que  $T_h$  est une transformation canonique quantifiée avec symbole d'ordre plus petit que  $-1$ .

Pour démontrer (4.1.25), on commence par montrer que si  $\psi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  est supportée dans  $[s_\delta, +\infty[$  alors  $\psi(-h^2\Delta_g)e_k^h = O(h^\infty)$ . Pour cela, on part de l'équation  $(T_h - \mu_k(h))e_k^h = 0$ , dont on déduit aisément à l'aide du Lemme 4.1.6

$$(\Gamma_d(-h^2\Delta_g) - \mu_k(h))\psi(-h^2\Delta_g)e_k^h = O(h^2) \quad (4.1.26)$$

Avec le choix de troncatures que nous avons fait, l'opérateur apparaissant dans le membre de gauche est elliptique et on obtient l'estimée annoncée. Pour traiter les hautes fréquences, on utilise le Lemme 4.1.5.  $\square$

On démontre ensuite des estimations de régularité sans perte de puissance de  $h$ . ces estimations sont à comparer aux estimations de Sobolev des fonctions propres du Laplacien sur une variété compacte.

**Lemme 4.1.8** *Quelque soit  $\delta > 0$  et pour tout  $j \in \mathbb{N}$ , il existe une constante  $C_{\delta,j} > 0$  telle que pour toute fonction propre  $e_k^h$  de  $T_h$  associée à une valeur propre  $\mu_k(h) \in [\delta, 1]$ , on a*

$$\|(1 - \Delta_g)^{\frac{j}{2}}e_k^h\|_{L^2(M, d_g x)} \leq C_{\delta,j} \left(1 + \frac{1 - \mu_k(h)}{h^2}\right)^{\frac{j}{2}} \|e_k^h\|_{L^2(M, d_g x)}. \quad (4.1.27)$$

*Preuve.* Soit  $e_k^h$  comme ci dessus. D'après le Lemme 4.1.7 (et en interpolant un peu), il existe une fonction de troncature  $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  telle que  $e_k^h - \chi(-h^2\Delta_g)e_k^h \in \mathcal{O}_{C^\infty}(h^\infty)$ . Il reste donc à estimer  $\tilde{e}_k^h = \chi(-h^2\Delta_g)e_k^h$ . On déduit de ce qui précède que  $((T_h - 1)\chi(-h^2\Delta_g) + h^2\tau_h)\tilde{e}_k^h \in \mathcal{O}_{C^\infty}(h^\infty)$  et on déduit du Lemme 4.1.6 que

$$((\Gamma_d - 1)(-h^2\Delta_g) + h^2A_h + h^2\tau_h)\tilde{e}_k^h \in \mathcal{O}_{C^\infty}(h^\infty) \quad (4.1.28)$$

avec  $A_h \in \mathcal{E}_{cl}^{-\infty}$ . Le point clef de la preuve consiste à observer que  $(\Gamma_d - 1)(s) = -sF_d(s)$  avec  $F_d$  satisfaisant les conclusions du Lemme 3.4.1. On obtient alors

$$-\Delta_g F_d(-h^2\Delta_g)\tilde{e}_k^h = (A_h + \tau_h)\tilde{e}_k^h + \mathcal{O}_{C^\infty}(h^\infty) \quad (4.1.29)$$

Puisque  $A_h$  est borné uniformément par rapport à  $h$  sur tous les espaces de Sobolev  $H^j(M)$ , on déduit de (4.1.29) que pour tout  $j \in \mathbb{N}$ ,

$$\|F_d(-h^2\Delta_g)\tilde{e}_k^h\|_{H^{j+2}(M)} \leq C(1 + \tau_h)\|\tilde{e}_k^h\|_{H^j(M)} \quad (4.1.30)$$

Pour conclure, il suffit de remarquer que  $F_d$  étant strictement positive, elle est minorée uniformément par une constante strictement positive indépendante de  $h$  sur le support de  $\chi$ .  $\square$

## Analyse du spectre

Nous sommes maintenant en position de prouver les résultats du Théorème 4.1.1

Le fait que le spectre de  $T_h$  soit situé au dessus d'une certaine constante  $\gamma_0 > -1$  est une conséquence immédiate des Lemmes 4.1.6, 4.1.5, 3.4.1 et de l'inégalité de Garding.

Commençons la preuve de (4.1.2). Pour  $k \in \mathbb{N}$ , notons  $m_k = \dim(\text{Ker}(\Delta_g + \lambda_k))$  la multiplicité de  $\lambda_k$ . Soit  $\rho_0 \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  égale à 1 près de zéro. Alors, il existe  $h_0 > 0$  tel que pour



tout  $h \in ]0, h_0]$ , on a  $e = \rho_0(-h^2\Delta_g)e$  quelque soit  $e \in \text{Ker}(\Delta_g + \lambda_k)$  avec  $k \leq L$ . On déduit du Lemme 4.1.6 que

$$\begin{aligned} \|(T_h - \Gamma_d(-h^2\Delta_g))(e)\|_{L^2(M, d\nu_h)} &= \|(T_h - \Gamma_d(-h^2\Delta_g))\rho(h^2\Delta_g)(e)\|_{L^2(M, d\nu_h)} \\ &= h^2\|Op_h(a)e\|_{L^2(M, d\nu_h)} = O(h^4)\|\Delta_g e\|_{L^2(M, d_g x)} \end{aligned} \quad (4.1.31)$$

Par ailleurs, on a  $\Gamma_d(-h^2\Delta_g)e = \Gamma_d(h^2\lambda_k)e = (1 + h^2\Gamma'_d(0)\lambda_k + O(h^4))e$ . En combinant cela avec (4.1.31) on obtient  $\|(|\Delta_h^W| - \lambda_k)e\|_{L^2(M, d\nu_h)} = O(h^2)$  pour tout  $e \in \text{Ker}(\Delta_g + \lambda_k)$ . Comme  $|\Delta_h^W|$  est auto-adjoint sur  $L^2(M, d\nu_h)$ , ceci prouve qu'il existe  $C_0 > 0$  tel que

$$\forall h \in ]0, h_0], \forall 0 \leq k \leq L, \text{card}\left(\text{Spec}(|\Delta_h^W|) \cap [\lambda_k - C_0h^2, \lambda_k + C_0h^2]\right) \geq m_k. \quad (4.1.32)$$

Réciproquement, si  $e^h$  est une fonction propre normalisée  $|\Delta_h^W|$ ,  $|\Delta_h^W|e^h = \tau_h e^h$ , avec  $\tau_h$  borné, on déduit du Lemme 4.1.7 que  $e^h - \rho_0(-h^2\Delta_g)e^h \in \mathcal{O}_{C^\infty}(h^\infty)$ . En utilisant le Lemme 4.1.8 avec  $\tau_h$  borné, on obtient  $\|e^h\|_{H^j(M)} \leq C_j$  pour tout  $j$ , avec  $C_j$  indépendant de  $h$ . Le même argument que ci-dessus montre qu'il existe  $C > 0$  indépendant de  $h$  tel que

$$\|(\tau_h + \Delta_g)(e^h)\|_{L^2(M, d\nu_h)} \leq Ch^2 \quad (4.1.33)$$

et l'on déduit du théorème spectral que  $\text{dist}(\tau_h, \text{Spec}(-\Delta_g)) \leq Ch^2$ .

Il reste à monter que pour  $h$  assez petit, on égalité dans le membre de droite de (4.1.32). Soit  $p \geq m_k$  et  $u_1(h), \dots, u_p(h)$  une famille de vecteurs propres de  $|\Delta_h^W|$  associés à la valeur propre  $\tau_j(h) \in [\lambda_k - C_0h^2, \lambda_k + C_0h^2]$ , orthonormale pour le produit scalaire  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2(M, d\nu_h)}$ . D'après le Lemme 4.1.8, il existe une sous-suite  $(h_n)$  tendant vers 0 lorsque  $n \rightarrow \infty$  et telle que  $u_l(h_n)$  converge dans  $H^2$ . D'après (4.1.33), sa limite  $f_l$  est solution de  $-\Delta_g f_l = \lambda_k f_l$  pour tout  $l = 1, \dots, p$  et les fonctions  $f_l$  sont orthogonales pour le produit scalaire  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{L^2(M, d_g x)}$ . Ceci prouve que  $m_k \geq p$ , et achève la preuve de (4.1.2). Ceci montre aussi que 1 est valeur propre simple de  $T_h$ .

L'estimation (4.1.5) est une réécriture du Lemme 4.1.8. Il reste donc à prouver l'estimation de Weyl. Notons  $N_0(\lambda, h)$  le nombre de valeurs propres de  $\Gamma_d(-h^2\Delta_g)$  dans l'intervalle  $[1 - \lambda, 1]$ . En utilisant le Lemme 4.1.6 et le principe du min-max, on montre qu'il existe des constantes  $C_+, C_- > 0$  telles que pour  $\tau > 0$  assez grand, on a

$$N((\tau - C_+)h^2, h) \leq N_0(\tau h^2, h) \leq N((\tau + C_-)h^2, h) \quad (4.1.34)$$

Il suffit donc de montrer que  $N_0$  vérifie l'estimation suivante :

$$|N_0(\tau h^2, h) - (2\pi h)^{-d} \int_{\Gamma_d(|\xi|_x^2) \in [1 - \tau h^2, 1]} dx d\xi| \leq C(1 + \tau)^{\frac{d-1}{2}}. \quad (4.1.35)$$

Celle ci s'obtient en combinant l'estimation de Weyl avec reste optimal pour le Laplacien sur une variété compacte, combinée avec la structure de la fonction  $\Gamma_d$ .

### Convergence des résolvantes

Le Théorème 4.1.2 se démontre à partir de la description du spectre obtenue dans le Théorème 4.1.1. On commence par introduire l'opérateur

$$|\Delta_h^0| = 2(d+2) \frac{1 - \Gamma_d(-h^2\Delta_g)}{h^2} \quad (4.1.36)$$

En utilisant le Lemme 3.4.1, on montre que

$$\|(z - |\Delta_h^0|)^{-1} - (z + \Delta_g)^{-1}\|_{L^2} \leq Ch^2 \quad (4.1.37)$$

uniformément par rapport à  $z \in U$ . La preuve se réduit donc à montrer que

$$\|(z - |\Delta_h^W|)^{-1} - (z - |\Delta_h^0|)^{-1}\|_{L^2} \leq Ch^2. \quad (4.1.38)$$

Cette estimation s'obtient à nouveau à partir des Lemmes 4.1.6 et 4.1.7 et de l'identité de la résolvante.

### Analyse de l'opérateur métropolisé

L'objet de cette section est de donner les ingrédients de démonstration du Théorème 4.1.3. Partant des définitions (4.1.7), on peut écrire  $M_h = T_h + R_h$  avec

$$R_h(f)(x) = m_h(x)f(x) + \int_{d_g(x,y) \leq h} \min\left(\frac{1}{|B(y,h)|} - \frac{1}{|B(x,h)|}, 0\right) f(y) d_g y \quad (4.1.39)$$

En écrivant un développement limité du volume des boules, on voit facilement que la fonction  $a(x, y, h) = h^{d-2} \min\left(\frac{1}{|B(y,h)|} - \frac{1}{|B(x,h)|}, 0\right)$  vérifie les estimations suivantes :

$$|a(x, y, h)| \leq Cd_g(x, y), \quad |\nabla_x a(x, y, h)| + |\nabla_y a(x, y, h)| \leq C \quad (4.1.40)$$

On en déduit aisément les estimations suivantes sur  $R_h$  :

$$\|R_h\|_{L^2 \rightarrow L^2} = O(h^3), \quad \|R_h\|_{H^1 \rightarrow H^1} = O(h^2). \quad (4.1.41)$$

A l'aide de cette estimation, il est assez facile de démontrer (4.1.11) et (4.1.12). Pour ce qui est de l'estimation des fonctions propres (4.1.13), elle demande un peu plus de travail. En effet, le noyau de  $M_h$  étant seulement Lipschitz, les techniques d'analyse microlocale ne s'appliquent pas et l'on ne peut pas démontrer d'estimation de Sobolev pour les fonctions propres de  $M_h$ . Pour contourner ce problème, on démontre de la régularité  $W^{1,p}$  et on utilise une injection de  $W^{1,p}$  dans  $L^\infty$ . On renvoie à la section 4 de [LM10] pour les détails.

### Convergence vers la mesure stationnaire

Nous esquissons ici la preuve du Théorème 4.1.4. Partant de la formule (3.3.7), on doit montrer qu'il existe  $A, h_0 > 0$  et  $\gamma(h) \simeq \gamma'(h) \simeq \frac{\lambda_1}{2(d+2)}$  tels que

$$e^{-\gamma'(h)nh^2} \leq \|M_h^n - \Pi_0\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq Ae^{-\gamma(h)nh^2}, \quad (4.1.42)$$

où  $\Pi_0$  est le projecteur orthogonal dans  $L^2(M, d\mu_M)$  sur l'espace des fonctions constantes

$$\Pi_0(f)(x) = \frac{1}{\text{Vol}(M)} \int_M f(y) d_g y. \quad (4.1.43)$$

La borne inférieure s'obtient facilement en remarquant que  $(M_h^n - \Pi_0)(\tilde{e}_1^h) = (1 - h^2 \tilde{\tau}_1^h)^n \tilde{e}_1^h$ , avec  $|\tilde{\tau}_1^h - \frac{\lambda_1}{2(d+2)}| \leq Ch$  d'après (4.1.11).

Passons maintenant à la preuve de la borne supérieure. Comme nous l'avons remarqué précédemment, l'existence d'un trou spectral fournit seulement une estimation  $L^2$ . Si l'on vise à

obtenir des estimations en variation totale, on doit estimer des opérateurs dans  $L^\infty$  et l'on perd l'orthogonalité des projecteurs. On doit donc utiliser des informations plus fines sur le spectre.

L'opérateur  $M_h^n$  étant Markovien, il est borné par 1 sur  $L^\infty$  (de même que  $\Pi_0$ ). Afin de prouver (4.1.42), on peut donc supposer  $n \geq C_0 h^{-2}$ . Soit  $\delta \in ]0, 1[$  tel que le spectre de  $M_h$  est contenu dans  $[-\delta, 1]$ . On décompose alors  $M_h - \Pi_0 = M_{h,1} + M_{h,2}$  avec

$$\begin{aligned} M_{h,1}(x, y) &= \sum_{\delta \leq \tilde{\mu}_k(h) < 1} (1 - h^2 \tilde{\tau}_k(h)) \tilde{e}_k^h(x) \tilde{e}_k^h(y) \\ M_{h,2} &= M_h - \Pi_0 - M_{h,1} \end{aligned} \quad (4.1.44)$$

où  $1 - h^2 \tilde{\tau}_k(h) = \tilde{\mu}_k(h)$ . D'après (4.1.44) et (4.1.13), il existe  $\alpha > 0$  tel que

$$\|M_{h,1}^n\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq \sum_{\tilde{\tau}_1(h) \leq \tilde{\tau}_k(h) \leq (1-\delta)h^{-2}} (1 - h^2 \tilde{\tau}_k(h))^n (1 + \tilde{\tau}_k(h))^\alpha \quad (4.1.45)$$

En utilisant l'inégalité  $1 - x \leq e^{-x}$ , et l'estimation de Weyl (4.1.12), on obtient

$$\|M_{h,1}^n\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq C \int_{\tilde{\tau}_1(h)}^\infty e^{-nh^2 x} (1+x)^\beta dx \leq C' e^{-nh^2 \tilde{\tau}_1(h)}, \quad \forall n \geq C_0 h^{-2} \quad (4.1.46)$$

et il reste à estimer  $M_{h,2}^n$ . En utilisant l'estimation  $\|M_{h,2}^n\|_{L^\infty \rightarrow L^2} \leq \|M_{h,2}^n\|_{L^2 \rightarrow L^2} \leq \delta^n$ , on montre qu'il existe  $C, \mu > 0$  tels que

$$\|M_{h,2}^n\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq C e^{-n\mu} \quad \forall n \geq 1/h. \quad (4.1.47)$$

Par suite la contribution de  $M_{h,2}^n$  est négligeable devant la borne que nous avons à démontrer (4.1.42).

#### 4.1.4 Convergence vers le mouvement brownien

Dans l'appendice de [LM10], nous utilisons l'analyse spectrale précédente pour donner une nouvelle construction du mouvement brownien sur une variété compacte sans bord  $(M, g)$ . Etant donné  $x_0 \in M$ , il s'agit de construire un espace de probabilité  $(\Omega, \mathcal{F}, P)$  et une famille de variables aléatoires  $(B_t)_{t \in [0, \infty[}$  tels que

(P1) On a  $B_0 = x_0$  presque sûrement et quels que soient  $p \in \mathbb{N}$ ,  $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_p$  des réels et  $A_1, \dots, A_p$  des Boreliens, la probabilité pour que  $B_{t_j} \in A_j$  pour tout  $j = 1, \dots, p$  est donnée par

$$\int_{x_1 \in A_1, \dots, x_p \in A_p} p_{t_p - t_{p-1}}(x_p, x_{p-1}) \dots p_{t_1 - t_0}(x_1, x_0) d_g x_p \dots d_g x_1 \quad (4.1.48)$$

où  $p_t(x, y)$  désigne le noyau de la chaleur au temps  $t$  pour l'opérateur de Laplace-Beltrami sur  $M$ .

(P2) Pour tout  $\omega \in \Omega$ , la fonction  $t \mapsto B_t(\omega)$  est continue.

Une manière de construire de telles variables aléatoires consiste à définir la mesure de Wiener sur l'espace des chemins issue de  $x_0$  sur  $M$ . Notons  $X_{x_0}$  l'ensemble des fonction continues  $\omega$  de  $[0, \infty[$  à valeurs dans  $M$ , telles que  $\omega(0) = x_0$ . On munit  $X_{x_0}$  de la topologie de la convergence uniforme sur les compacts de  $[0, \infty[$  et de la tribu des Boreliens associée  $\mathcal{B}$ . La mesure de Wiener

est l'unique mesure de probabilité sur  $X_{x_0}$  telle que pour tout  $0 < t_1 < t_2 < \dots < t_k$  et quels que soient  $A_1, \dots, A_k$  des Boreliens de  $M$ , on a

$$W_{x_0}(\omega(t_1) \in A_1, \omega(t_2) \in A_2, \dots, \omega(t_k) \in A_k) = \int_{A_1 \times A_2 \times \dots \times A_k} p_{t_k - t_{k-1}}(x_k, x_{k-1}) \dots p_{t_2 - t_1}(x_2, x_1) p_{t_1}(x_1, x_0) d_g x_1 d_g x_2 \dots d_g x_k \quad (4.1.49)$$

Une fois la mesure de Wiener construite, il est facile de définir les variables aléatoires  $(B_t)$ . Il suffit en effet de poser  $\Omega = X_{x_0}$ ,  $\mathcal{F} = \mathcal{B}$ ,  $P = W_{x_0}$  et

$$B_t(\omega) = \omega(t) \quad (4.1.50)$$

pour tout  $\omega \in \Omega$  et  $t > 0$ .

L'existence de la mesure de Wiener sur une variété compacte est connue depuis longtemps. On renvoie à [EM89] et [Hsu03]. Nous allons montrer comment la retrouver à partir des marches aléatoires que nous avons étudiées précédemment.

Pour tout  $h \in ]0, 1]$ , considérons le sous ensemble fermé  $\mathcal{M}_{h, x_0}^{\mathbb{N}}$  de l'espace produit  $M^{\mathbb{N}}$ , défini par

$$\mathcal{M}_{h, x_0}^{\mathbb{N}} = \{\underline{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n, \dots), \forall j \geq 0, d_g(x_j, x_{j+1}) \leq h\} \quad (4.1.51)$$

On munit  $M^{\mathbb{N}}$  de la topologie produit, ce qui en fait un espace compact métrisable. La chaîne de Metropolis issue de  $x_0$  permet de définir une mesure de probabilité  $\mathcal{P}_{x_0, h}$  sur  $M^{\mathbb{N}}$ , telle que  $\mathcal{P}_{x_0, h}(\mathcal{M}_{h, x_0}^{\mathbb{N}}) = 1$ . Il suffit de poser pour tout  $k \in \mathbb{N}$  et pour tout  $k$ -uplet de boreliens  $A_1, \dots, A_k \subset M$ ,

$$\mathcal{P}_{x_0, h}(x_1 \in A_1, x_2 \in A_2, \dots, x_k \in A_k) = \int_{A_1 \times A_2 \times \dots \times A_k} M_h(x_{k-1}, dx_k) \dots M_h(x_1, dx_2) M_h(x_0, dx_1) \quad (4.1.52)$$

où  $M_h(x, dy)$  est le noyau de Metropolis défini en (4.1.7).

On construit ensuite une application  $j_{x_0, h}$  de  $\mathcal{M}_{h, x_0}^{\mathbb{N}}$  dans  $X_{x_0}$  en reliant les points  $x_j$  par des géodésiques :

$$j_{x_0, h}(\underline{x}) = \omega \iff \forall j \geq 0 \quad \omega(jh^2/(d+2)) = x_j, \quad \text{et} \quad \forall t \in \left[ \frac{jh^2}{d+2}, \frac{(j+1)h^2}{d+2} \right] \\ \omega(t) \text{ est la courbe géodésique reliant } x_j \text{ à } x_{j+1} \text{ à la vitesse } h^{-2}(d+2)d_g(x_j, x_{j+1}). \quad (4.1.53)$$

Pourvu que  $h > 0$  soit plus petit que le rayon d'injectivité de la variété  $M$ , l'application  $j_{x_0, h}$  est bien définie et continue. Cette application nous permet de définir une mesure de probabilité  $P_{x_0, h}$  sur  $X_{x_0}$  comme étant la mesure image de  $\mathcal{P}_{x_0, h}$  par l'application  $j_{x_0, h}$ . Nous avons montré dans [LM10] que la mesure  $P_{x_0, h}$  converge faiblement vers la mesure de Wiener  $W_{x_0}$  lorsque  $h \rightarrow 0$ .

**Théorème 4.1.9** *Pour toute fonction continue bornée  $\omega \mapsto f(\omega)$  sur  $X_{x_0}$ , on a*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \int f dP_{x_0, h} = \int f dW_{x_0} \quad (4.1.54)$$

La stratégie de démonstration de ce théorème est la suivante. Dans un premier temps, on montre que la famille de probabilités  $(P_{x_0, h})_{h \in ]0, 1]}$  est compacte. On utilise pour cela un critère de Prohorov. On démontre ensuite que toute suite extraite converge nécessairement vers la mesure de Wiener.

Commençons par quelques rappels de probabilités (voir [KS88], [Bil68] et [Par67] pour plus de détails).

**Définition 4.1.10** Soit  $(X, d)$  un espace métrique,  $\mathcal{B}$  la tribu des boreliens associée et  $\Pi$  une famille de probabilités sur  $(X, \mathcal{B})$ . On dit que  $\pi$  est relativement compact si toute suite d'éléments de  $\Pi$  contient une sous suite faiblement convergente. On dit que  $\Pi$  est tendue si pour tout  $\epsilon > 0$  il existe un compact  $K \subset X$  tel que  $P(K) \geq 1 - \epsilon$  pour tout  $P \in \Pi$ .

Le théorème suivant fournit un critère de compacité.

**Théorème 4.1.11 ( Prohorov (1956))** Soit  $\Pi$  une famille de probabilités sur un espace métrique, complet, séparable  $(X, d)$ . Alors, cette famille est relativement compacte si et seulement si elle est tendue.

Revenons à la preuve du Théorème 4.1.9. On veut appliquer le théorème de Prohorov à la famille  $(P_{x_0, h})_{h \in ]0, 1]}$  sur l'espace  $X_{x_0}$ . Pour  $T, \delta > 0$  et  $\omega \in X_{x_0}$ , introduisons le module de continuité  $m^T(\omega, \delta) := \max_{|s-t| < \delta, 0 \leq s, t \leq T} d_g(\omega(s), \omega(t))$ . Le théorème d'Arzela-Ascoli suivant fournit une caractérisation des ensembles compacts de  $X_{x_0}$ .

**Théorème 4.1.12** Soit  $A \subset X_{x_0}$  un ensemble fermé. Alors  $A$  est compact si et seulement si  $\lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_{\omega \in A} m^T(\omega, \delta) = 0$  pour tout  $T > 0$ .

A l'aide de ce théorème on démontre le critère suivant qui assure qu'une famille de probabilité est tendue :

**Théorème 4.1.13** Une suite  $(P_n)_{n \in \mathbb{N}}$  de probabilités sur  $X_{x_0}$  est tendue si et seulement si

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \sup_{n \in \mathbb{N}} P_n(\{\omega \in X_{x_0}, m^T(\omega, \delta) > \epsilon\}) = 0$$

pour tout  $T, \epsilon > 0$ .

Considérons la famille de probabilités  $(P_{x_0, h})_{h \in ]0, 1]}$ . Pour  $\epsilon, T, \delta > 0$ , on note  $\tilde{T} = \frac{T}{d+2}$  et  $\tilde{\delta} = \frac{\delta}{d+2}$ . On a

$$\begin{aligned} P_{x_0, h}(\{\omega \in X_{x_0}, m^T(\omega, \delta) > 8\epsilon\}) &= \\ &= \mathcal{P}_{x_0, h}(\{X \in M^{\mathbb{N}}, \exists t, s < T, |t - s| < \delta, d_g(j_{x_0, h}(X)(t), j_{x_0, h}(X)(s)) > 8\epsilon\}) \\ &\leq \mathcal{P}_{x_0, h}(\{X \in M^{\mathbb{N}}, X_0 = x_0 \text{ et } \exists j < l \leq h^{-2}\tilde{T}, (l - j)h^2 \leq \tilde{\delta}, d_g(X_j, X_l) > 4\epsilon\}) \\ &\leq \frac{2C}{\tilde{\delta}} \sup_{z_0 \in M, n \leq h^{-2}\tilde{\delta}} \mathcal{P}_{z_0, h}(\{X \in M^{\mathbb{N}}, X_0 = z_0 \text{ et } d_g(X_n, z_0) > \epsilon\}) \end{aligned} \quad (4.1.55)$$

Or, par définition, on a

$$\mathcal{P}_{z_0, h}(\{X \in M^{\mathbb{N}}, X_0 = z_0 \text{ et } d_g(X_n, z_0) > \epsilon\}) = M_h^n(\mathbb{1}_{d_g(y, z_0) > \epsilon})(z_0) \quad (4.1.56)$$

En utilisant les informations précédentes sur l'opérateur  $M_h$ , on montre ensuite l'estimation fondamentale suivante :

**Proposition 4.1.14** Il existe des constantes  $C, A, a, c_0, h_0 > 0$  telles que pour tout  $\epsilon \in ]0, \epsilon_0]$ , pour tout  $\delta \in ]0, c_0\epsilon^2]$  et pour tout  $h \in ]0, h_0]$ , l'inégalité suivante est vraie :

$$\sup_{x_0 \in M, nh^2 \leq \delta} \mathcal{P}_{x_0, h}(d_g(X_n, x_0) > \epsilon) \leq C\epsilon^{-A} e^{-a\epsilon^2/\delta} \quad (4.1.57)$$

*Preuve.* La preuve est assez technique. On se contente de donner ici les idées générales.

Soit  $\varphi(r) \in C^\infty([0, \infty[)$  une fonction croissante égale à 0 si  $r \leq 3/4$  et égale à 1 si  $r \geq 1$ . Le point de départ consiste à remarquer que

$$\mathcal{P}_{x_0, h}(d_g(X_n, x_0) > \epsilon) = \int_{d_g(y, x_0) > \epsilon} M_h^n(x_0, dy) = M_h^n(1_{d_g(y, x_0) > \epsilon})(x_0) \leq M_h^n(\varphi_{x_0, \epsilon})(x_0)$$

où  $\varphi_{x_0, \epsilon}(x) = \varphi(\frac{d_g(x, x_0)}{\epsilon})$ . Il s'agit donc d'estimer  $M_h^n \varphi_{x_0, \epsilon}(x_0)$ . En utilisant à nouveau l'approximation de  $M_h$  par un opérateur pseudo-différentiel, on se ramène à montrer qu'il existe des constantes  $c_0, c_1 > 0$  telles que pour  $nh^2 \leq c_0 \epsilon^2$ , on a

$$\|M_h^n(\varphi_{x_0, \epsilon})\|_{L^2(B(x_0, \epsilon/2))} \leq C e^{-a\epsilon^2/nh^2} \quad (4.1.58)$$

$$\|M_h^n(\varphi_{x_0, \epsilon})\|_{L^\infty(B(x_0, \epsilon/4))} \leq Ch^{-d/2} e^{-a\epsilon^2/nh^2} \quad (4.1.59)$$

Pour cela, on écrit

$$M_h^n = \frac{1}{2i\pi} \int_\sigma z^n (z - M_h)^{-1} dz,$$

où  $\sigma$  est un contour (à choisir convenablement) dans  $\mathbb{C}$  entourant le spectre de  $M_h$ . On décompose  $\sigma$  en  $\sigma_1 \cup \sigma_2$  où  $\sigma_2$  est contenu dans  $|z| \leq r_0 < 1$ .

Grâce au facteur  $z^n$ , l'intégrale sur  $\sigma_2$  s'estime facilement.

Pour estimer l'intégrale sur  $\sigma_1$ , on choisit un contour sur lequel  $z^n$  n'est pas trop grand et  $f_z(x) = \mathbb{1}_{d_g(x, x_0) < \frac{\epsilon}{2}} (z - M_h)^{-1} \varphi_{x_0, \epsilon}$  décroît exponentiellement. L'obtention d'estimations de  $f_z$  s'obtient en considérant l'opérateur conjugué

$$M_{h, \phi} = e^{\phi/h} M_h e^{-\phi/h},$$

où  $\phi(x)$  est une phase complexe égale à 0 sur  $B(x_0, \frac{\epsilon}{2})$ . On montre alors qu'on peut choisir  $\sigma_1$  de sorte que la résolvante  $(M_{h, \phi} - z)^{-1}$  soit uniformément bornée pour  $z \in \sigma_1$  (ici on utilise fortement que l'opérateur  $M_h$  propage à vitesse au plus  $h$ ).

On peut alors contrôler  $\|f_z\|_{L^2}$  par  $\|e^{\phi/h} \varphi_{x_0, \epsilon}\|_{L^2}$ , ce qui permet (en choisissant bien  $\sigma_1$ ) de récupérer la décroissance perdue par  $z^n$ . On renvoie à [LM10] pour les détails.  $\square$

De cette proposition et de (4.1.55), on déduit que

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \left( \sup_{h \in ]0, h_0]} P_{x_0, h} \left( \max_{|s-t| \leq \delta, 0 \leq s, t \leq T} d_g(\omega(s), \omega(t)) > \epsilon \right) \right) = 0. \quad (4.1.60)$$

En invoquant le théorème 4.1.13, on en déduit que la famille de probabilités  $(P_{x_0, h})_{h \in ]0, h_0]}$  est tendue. On peut donc en extraire une sous suite convergente vers une limite  $P_{x_0}$ .

Il reste alors à montrer que toute limite  $P_{x_0, h_k}$ ,  $h_k \rightarrow 0$ , est nécessairement égale à la mesure de Wiener. On doit donc montrer que pour tout  $0 < t_1 < \dots < t_m$  et pour toute fonction continue  $f(x_1, \dots, x_m)$ , on a

$$\begin{aligned} & \lim_{k \rightarrow \infty} \int f(\omega(t_1), \dots, \omega(t_m)) P_{x_0, h_k} \\ &= \int f(x_1, \dots, x_m) p_{t_m - t_{m-1}}(x_m, x_{m-1}) \dots p_{t_2 - t_1}(x_2, x_1) p_{t_1}(x_1, x_0) d_g x_1 d_g x_2 \dots d_g x_m \end{aligned} \quad (4.1.61)$$

En revenant aux définitions précédentes ceci se réduit à montrer la proposition suivante dont la preuve découle à nouveau de l'analyse précédente de l'opérateur  $M_h$  :

**Proposition 4.1.15** *Pour tout  $f \in C^0(M)$ , et pour tout  $t > 0$ , on a*

$$\lim_{h \rightarrow 0} \|e^{t\Delta_g/2}(f) - M_h^{n(t,h)}(f)\|_{L^\infty} = 0 \quad (4.1.62)$$

où  $n(t, h)$  désigne la partie entière de  $h^{-2}(d+2)t$ .

## 4.2 Algorithme de Metropolis sur un ouvert borné

Nous décrivons maintenant les résultats obtenus avec P. Diaconis et G. Lebeau [DLM08] sur le problème qui a historiquement motivé les travaux de Metropolis. On suppose ici que  $\Omega$  est un ouvert borné de  $\mathbb{R}^d$  muni de la métrique euclidienne. On suppose que la frontière de  $\Omega$  est de régularité Lipschitz et on se donne une densité de probabilité  $\rho(x)$  sur  $\Omega$ . Pour  $A > 0$  assez grand,  $\Omega$  est contenu dans une boîte  $[-A, A]^d$ . En quotientant cet ensemble par  $(2A\mathbb{Z})^d$ , on peut voir  $\Omega$  comme un ouvert du tore plat  $M = (\mathbb{R}/2A\mathbb{Z})^d$ . Afin d'alléger les notations, on supposera que  $A = \pi$ . On se trouve donc dans la situation décrite à la section 3.4 avec  $\bar{\theta} = 1$  et  $\theta = \rho$ . Pour  $x \in M$ , la mesure de la boule  $B_h(x)$  vérifie  $v_h(x) = \alpha_d h^d$ , où  $\alpha_d$  désigne le volume de la boule unité de  $M$ . Le noyau de Metropolis correspondant à cette situation prend donc la forme :

$$M_h(x, dy) = m_h(x)\delta_{y=x} + K_h(x, dy) \quad (4.2.1)$$

avec

$$K_h(x, dy) = \frac{1}{\alpha_d h^d} \min\left(1, \frac{\rho(y)}{\rho(x)}\right) \mathbb{1}_{d(x,y) < h} dy \quad (4.2.2)$$

et

$$m_h(x) = 1 - \int_{\Omega} K_h(x, dy) \quad (4.2.3)$$

C'est un opérateur autoadjoint sur  $L^2(\Omega, d\pi)$ . Dans un premier temps nous décrivons "grossièrement" le spectre de  $M_h$  sans faire d'hypothèse de régularité sur la densité  $\rho$ .

### 4.2.1 Trou spectral pour une densité peu régulière

**Théorème 4.2.1** *Soient  $0 < m \leq M < \infty$  des réels fixés. Il existe  $h_0 > 0$ ,  $\delta_0 \in ]0, 1/2[$  et des constantes  $C_i > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et pour toute densité de probabilité  $\rho$  sur  $\Omega$  telle que  $m \leq \rho(x) \leq M$  pour tout  $x \in \Omega$ , les assertions suivantes sont vérifiées :*

- i) *Le spectre de  $M_h$  est contenu dans  $[-1 + \delta_0, 1]$ , 1 est valeur propre simple de  $M_h$ , et  $\text{Spec}(M_h) \cap [1 - \delta_0, 1]$  est un ensemble discret. De plus pour tout  $0 \leq \lambda \leq \delta_0$ , le nombre de valeurs propres (comptées avec multiplicité) de  $M_h$  dans  $[1 - \lambda, 1]$  vérifie*

$$N(\lambda, h) \leq C_1(1 + \lambda h^{-2})^{d/2}. \quad (4.2.4)$$

- ii) *Le trou spectral  $g(h)$  vérifie*

$$C_2 h^2 \leq g(h, \rho) \leq C_3 h^2 \quad (4.2.5)$$

La fin de cette section est consacrée à la preuve de ce théorème. On commence par remarquer qu'on peut supposer sans perte de généralité que la densité  $\rho$  est constante (disons égale à 1). En effet, si  $\rho_1, \rho_2$  sont deux densités telles que  $m \leq \rho_i(x) \leq M$  pour tout  $x$ , alors on a

$$\begin{aligned} \rho_2(x) &\leq \rho_1(x) \left(1 + \frac{\|\rho_1 - \rho_2\|_\infty}{m}\right), \\ K_{h, \rho_1}(x, y)\rho_1(x) &\leq K_{h, \rho_2}(x, y)\rho_2(x) \left(1 + \frac{\|\rho_1 - \rho_2\|_\infty}{m}\right), \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

et on déduit de la caractérisation (3.4.14) que leurs trous spectraux respectifs  $g_1(h)$  et  $g_2(h)$  vérifient

$$\frac{g_1(h)}{g_2(h)} \leq \left(1 + \frac{\|\rho_1 - \rho_2\|_\infty}{m}\right)^3 \quad (4.2.7)$$

On supposera donc dans cette section que  $\rho = 1$ . On commence par l'étude du spectre près de 1 et  $-1$ .

### Trous spectraux en 1 et $-1$

Commençons par étudier le spectre essentiel de  $M_h$ . Il est clair que  $K_h(x, dy)$  est le noyau d'un opérateur compact. Par suite, le spectre essentiel de  $M_h$  est donné par l'image de la fonction  $m_h$ . Cette fonction est clairement nulle si  $x \in \Omega$  vérifie  $\text{dist}(x, \partial\Omega) > h$ . Près du bord, en utilisant une paramétrisation Lipschitz de la frontière et en posant  $y = x + hz$ , on voit clairement qu'il existe  $\delta_0 > 0$  tel que  $m_h(x) \leq 1 - \delta_0$ . Ceci montre que le spectre essentiel de  $T_h$  est contenu dans  $[-1, 1 - \delta_0]$ .

On peut donc étudier le trou spectral associé à  $M_h$ . D'après les formules (3.4.12) à (3.4.16) (ici  $\rho = 1$  donc  $M_h = T_h$ ), le trou spectral  $g(h)$  est la meilleure constante telle que l'inégalité suivante soit vraie :

$$\mathcal{V}_h^\Omega(u) \leq \frac{1}{g(h)} \mathcal{E}_h^\Omega(u) \quad (4.2.8)$$

où  $\mathcal{E}_h^\Omega(u) := \langle u - M_h u, u \rangle_{L^2(\Omega)}$  et  $\mathcal{V}_h^\Omega(u) = \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 - \langle u, 1 \rangle_{L^2(\Omega)}^2$ . Un calcul immédiat montre que

$$\mathcal{V}_h^\Omega(u) = \frac{1}{2} \int_{\Omega \times \Omega} (u(x) - u(y))^2 dx dy \quad (4.2.9)$$

et

$$\mathcal{E}_h^\Omega(u) = \frac{1}{2\alpha_d h^d} \int_{\Omega \times \Omega} \mathbb{1}_{|x-y| < h} (u(x) - u(y))^2 dx dy \quad (4.2.10)$$

Nous allons utiliser des techniques connues sous le nom de "**méthode du chemin**". On renvoie à [DSC98] pour de nombreuses références dans le contexte d'un espace d'état discret.

La première étape de la preuve du théorème 4.2.1 consiste à démontrer une sorte de Lemme de doublement pour notre opérateur.

**Lemme 4.2.2** *Pour tout  $\alpha > 1$ , il existe  $C > 0$  et  $h_0 > 0$  tels que*

$$\mathcal{E}_{\alpha h}^\Omega(u) \leq C \mathcal{E}_h^\Omega(u) \quad \forall u \in L^2(\Omega), \forall h \in ]0, h_0]. \quad (4.2.11)$$

*Preuve.* On commence par traiter le cas où  $\Omega$  est un ouvert convexe. Sous cette hypothèse, en utilisant l'inégalité

$$|u(x) - u(y)| \leq |u(x) - u(\frac{x+y}{2})| + |u(\frac{x+y}{2}) - u(y)| \quad (4.2.12)$$

on obtient

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\alpha h}^\Omega(u) &= \frac{(h\alpha)^{-d}}{2\alpha_d} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \mathbb{1}_{|x-y| \leq \alpha h} |u(x) - u(y)|^2 dx dy \\ &\leq \frac{(h\alpha)^{-d}}{\alpha_d} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \mathbb{1}_{|x-y| \leq \alpha h} |u(x) - u(\frac{x+y}{2})|^2 dx dy \\ &\leq \frac{2^{2-d} (h\alpha/2)^{-d}}{\alpha_d} \int_{\phi(\Omega \times \Omega)} \mathbb{1}_{|x-y| \leq \frac{\alpha h}{2}} |u(x) - u(y)|^2 dx dy, \end{aligned} \quad (4.2.13)$$



où  $\phi(x, y) = (x, \frac{x+y}{2})$ . Comme  $\Omega$  est convexe, alors  $\phi(\Omega \times \Omega) \subset \Omega \times \Omega$  et par suite  $\mathcal{E}_{\alpha h}^\Omega(u) \leq 2\mathcal{E}_{\alpha h/2}^\Omega(u)$ . En itérant ce procédé, on obtient le résultat pour des domaines convexes.

Le passage à des domaines généraux se fait en utilisant un recouvrement de l'ouvert  $\Omega$  par des ouverts  $\omega_i$  convenables. Loin du bord, il suffit que les  $\omega_i$  soient convexes. Près du bord, on demande qu'après redressement de la frontière par un difféomorphisme Lipschitz  $\phi_i$ , l'ouvert  $\phi_i(\omega_i)$  soit convexe. On renvoie à [DLM08] pour les détails.  $\square$

On est maintenant en mesure de prouver l'estimation (4.2.5). Pour montrer l'inégalité de gauche, il suffit de la tester sur une fonction  $u \in C_0^\infty(\Omega)$  dont le support est contenu dans une petite boule  $Q \subset \Omega$  et telle que  $\int_\Omega u(x)dx = 0$ . Comme  $Q$  est convexe, on déduit de la formule de Taylor que  $\langle u - M_h u, u \rangle = O(h^2)$ .

On va maintenant montrer l'inégalité de droite dans (4.2.5) dans le cas où  $\Omega$  est convexe. Etant donné  $u \in L^2(\Omega)$ , on a

$$\mathcal{V}_h^\Omega(u) \leq Ch^{-1} \sum_{k=0}^{K(h)-1} \int_{\Omega \times \Omega} (u(x + k\hbar(y-x)) - u(x + (k+1)\hbar(y-x)))^2 dx dy, \quad (4.2.14)$$

où  $K(h) = O(h^{-1})$  est le plus grand entier inférieur  $h^{-1}$  et  $K(h)\hbar = 1$ . En effectuant le changement de variable  $x' = x + k\hbar(y-x)$ ,  $y' = x + (k+1)\hbar(y-x)$ , on obtient

$$\mathcal{V}_h^\Omega(u) \leq Ch^{-d-1}K(h) \int_{\Omega \times \Omega} \mathbb{1}_{|x'-y'| < \hbar \text{diam}(\Omega)} (u(x') - u(y'))^2 dx' dy'. \quad (4.2.15)$$

En utilisant le Lemme 4.2.2, on en déduit immédiatement l'inégalité (4.2.5) dans le cas où  $\Omega$  est convexe. Le cas d'un ouvert non convexe se traite à nouveau en utilisant un recouvrement par des ouverts convenables et le Lemme 4.2.2.

On remarque au passage que l'inégalité (4.2.5) combinée avec la définition (3.4.14) montre que 1 est valeur propre simple de  $M_h$ . Dans le même esprit que la preuve précédente, on peut montrer l'existence de  $\delta_0 > 0$  tel que le spectre de  $M_h$  est contenu dans  $[-1 + \delta_0, 1]$ . On adopte à nouveau une approche variationnelle. Il s'agit de montrer qu'il existe  $\delta_0 > 0$  tel que pour tout  $u \in L^2(\Omega)$ , on a  $\langle u + M_h u, u \rangle \geq (1 - \delta_0)\|u\|_{L^2(\Omega)}^2$ . En utilisant la symétrie du noyau  $K_h$ , on a

$$\langle u + M_h u, u \rangle_{L^2(\Omega)} = \frac{1}{2} \int_{\Omega \times \Omega} |u(x) + u(y)|^2 K_h(x, dy) dx + 2\langle m_h u, u \rangle_{L^2(\Omega)}. \quad (4.2.16)$$

On doit donc prouver l'existence de constantes  $h_0, C_0 > 0$  telles que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et tout  $u \in L^2(\Omega)$ , l'inégalité suivante soit vérifiée :

$$\int_{\Omega \times \Omega} h^{-d} \mathbb{1}_{|x-y| < h} |u(x) + u(y)|^2 dx dy \geq C_0 \|u\|_{L^2(\Omega)}^2. \quad (4.2.17)$$

Comme l'ouvert  $\Omega$  est Lipschitz, il existe des constantes  $C_1, C_2 > 0$  et un recouvrement de  $\Omega$  par des ouverts  $\omega_j$  tels que  $\text{diam}(\omega_j) < h/2$ ,  $\text{vol}(\omega_j) \geq C_1 h^d$  et pour tout  $j$ , le nombre de  $k$  tels que  $\omega_j \cap \omega_k \neq \emptyset$  est borné par  $C_2$ . On a alors

$$\begin{aligned} C_2 \int_{\Omega \times \Omega} h^{-d} \mathbb{1}_{|x-y| < h} |u(x) + u(y)|^2 dx dy &\geq \sum_j h^{-d} \frac{1}{\alpha_d} \int_{\omega_j \times \omega_j} |u(x) + u(y)|^2 dx dy \\ &\geq \sum_j 2h^{-d} \frac{1}{\alpha_d} \text{vol}(\omega_j) \|u\|_{L^2(\omega_j)}^2 \geq \frac{2C_1}{\alpha_d} \|u\|_{L^2(\Omega)}^2, \end{aligned} \quad (4.2.18)$$

ce qui prouve (4.2.17).

## Estimation de la fonction de comptage

On démontre ici l'estimation (4.2.4). Par ailleurs, on met en place quelques outils qui seront utiles dans l'étude de la convergence vers la mesure stationnaire. L'idée générale consiste à trouver un opérateur de référence auquel comparer  $M_h$ . Ici, l'ouvert  $\Omega$  étant contenu dans un tore plat, l'opérateur de référence sera l'opérateur de marche aléatoire sur cette variété particulière, dont on a vu qu'il était particulièrement simple (c'est une fonction explicite du Laplacien). On introduit l'opérateur de marche aléatoire  $N_h$  sur le tore  $\Pi^d = (\mathbb{R}/2\pi\mathbb{Z})^d$ , où l'on a supposé pour simplifier les notations que  $\Omega \subset \Pi^d$ . On a

$$N_h u(x) = \frac{1}{\alpha_d h^d} \int_{\Pi^d} \mathbb{1}_{d(x,y) < h} u(y) dy \quad (4.2.19)$$

où  $d(x, y)$  désigne la distance euclidienne sur le tore. La forme de Dirichlet associée à  $N_h$  est

$$\mathcal{E}_h^\Pi(u) = \frac{1}{2\alpha_d h^d} \int_{\Pi^d \times \Pi^d} \mathbb{1}_{d(x,y) < h} (u(x) - u(y))^2 dx dy \quad (4.2.20)$$

et la variance

$$\mathcal{V}_h^\Pi(u) = \frac{1}{2} \int_{\Pi^d \times \Pi^d} (u(x) - u(y))^2 dx dy. \quad (4.2.21)$$

Dans le cas présent du tore, toutes ces quantités ont des expressions agréables. D'après la formule (4.1.1), l'opérateur  $N_h$  s'écrit

$$N_h = \Gamma_d(-h^2 \Delta) \quad (4.2.22)$$

où  $\Gamma_d$  est définie en (3.4.23).

On introduit maintenant la théorie de Fourier sur le tore. On notera  $f_k(x) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{ik \cdot x}$ ,  $k \in \mathbb{Z}^d$  la base orthonormée des fonctions propres du Laplacien sur  $\Pi^d$ . Pour  $v \in L^2(\Pi^d)$ , on notera  $c_k(v) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\Pi^d} v(x) e^{-ik \cdot x} dx$  le coefficient de Fourier de  $v$  associé à la fréquence  $k \in \mathbb{Z}^d$ . Les normes  $L^2$  et  $H^1$  sur  $\Pi$  s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \sum_{z \in \mathbb{Z}^d} |c_k(v)|^2 \\ \|v\|_{H^1(\Omega)}^2 &= \sum_{z \in \mathbb{Z}^d} (1 + |k|^2) |c_k(v)|^2 \end{aligned} \quad (4.2.23)$$

où  $|k|^2 = \sum_{j=1}^d k_j^2$ . Par ailleurs, l'identité de Parseval nous fournit l'expression suivante pour la forme de Dirichlet

$$\mathcal{E}_h^\Pi(v) = \sum_{k \in \mathbb{Z}^d} (1 - \Gamma_d(h^2 |k|^2)) |c_k(v)|^2 \quad (4.2.24)$$

Or, on déduit facilement du Lemme 3.4.1, qu'il existe  $\eta > 0$  suffisamment petit et  $c > 0$  tels que  $1 - \Gamma_d(s) > cs$  si  $0 < s < \eta$  et  $1 - \Gamma_d(s) > c$  si  $s > \eta$ . Par suite,

$$\mathcal{E}_h^\Pi(v) \geq c \left( \sum_{h^2 |k|^2 < \eta^2} h^2 |k|^2 |c_k(v)|^2 + \sum_{h^2 |k|^2 \geq \eta^2} |c_k(v)|^2 \right) \quad (4.2.25)$$

Afin de comparer les opérateurs  $M_h$  et  $N_h$  nous étendons les fonctions définies sur  $\Omega$  au tore  $\Pi_d$ . En utilisant des cartes locales près de la frontière  $\partial\Omega$  qui est Lipschitz, on construit facilement un opérateur continu de prolongement  $E : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Pi^d)$  qui soit continu de  $H^1(\Omega)$  dans  $H^1(\Pi^d)$  et tel que  $E(u)(x) = 0$  sur le complémentaire d'un voisinage de  $\bar{\Omega}$ . Le Lemme suivant est le point clef de la preuve de l'estimation Weyl et des estimations des fonctions propres à venir.

**Lemme 4.2.3** *Il existe des constantes  $C_0, h_0 > 0$  telles que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et pour tout  $u \in L^2(\Omega)$ , on ait :*

$$\mathcal{E}_h^\Omega(u)/C_0 \leq \mathcal{E}_h^\Pi(E(u)) \leq C_0 (\mathcal{E}_h^\Omega(u) + h^2 \|u\|_{L^2}^2). \quad (4.2.26)$$

*De plus, il existe  $C_1 > 0$  tel que pour tout  $h \in ]0, h_0]$ , et pour toute fonction  $u \in L^2(\rho)$  vérifiant*

$$\|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + h^{-2} \mathcal{E}_h^\Omega(u) \leq 1$$

*on ait la décomposition  $u = u_L + u_H$  avec  $u_L \in H^1(\Omega)$ ,  $\|u_L\|_{H^1} \leq C_1$ , et  $\|u_H\|_{L^2} \leq C_1 h$ .*

*Preuve.* La démonstration de (4.2.26) est élémentaire. Il suffit d'utiliser la définition de l'opérateur de prolongement  $E$ , de travailler dans des cartes locales près du bord de l'ouvert et de faire quelques changements de variables dans les expressions (4.2.10) et (4.2.20) (en fait des symétries par rapport au bord).

Concentrons nous sur la preuve de la décomposition  $u = u_L + u_H$ . Supposons que  $u \in L^2(\Omega)$  vérifie  $\|u\|_{L^2(\Omega)}^2 + h^{-2} \mathcal{E}_h^\Omega(u) \leq 1$  et notons  $v = E(u)$  son extension au tore. De (4.2.26), on déduit que  $\mathcal{E}_h^\Pi(v) \leq C_0 h^2$ . Pour  $\eta > 0$  petit, posons  $v = v_L + v_H$  avec

$$v_L = \sum_{h^2|k|^2 \leq \eta^2} c_k(v) f_k \quad \text{et} \quad v_H = \sum_{h^2|k|^2 \geq \eta^2} c_k(v) f_k \quad (4.2.27)$$

En utilisant (4.2.25), il vient immédiatement  $\|v_H\|_{L^2(\Pi^d)} \leq Ch^2$  et  $\|v_L\|_{H^1(\Pi^d)} \leq C$ . Il suffit alors de prendre  $u_L = (v_L)|_\Omega$  et  $u_H = (v_H)|_\Omega$ .  $\square$

La seconde partie du lemme précédent est un résultat de compacité sur la famille des fonctions propres de  $M_h$ . Plus précisément, si  $e_h$  est une fonction normalisée dans  $L^2$  telle que  $M_h e_h = (1 - h^2 z_h) e_h$  pour un certain  $z_h$  borné uniformément par rapport  $h$ , alors le Lemme précédent permet de décomposer la famille de fonctions propres  $(e_h)_h$ , en une partie bornée dans  $H^1$  (uniformément par rapport à  $h$ ) et une partie petite dans  $L^2$ . Il montre donc que la famille  $(e_h)_h$  est compacte dans  $L^2$ . Ca sera un point crucial dans l'étude précisée du spectre.

Nous sommes maintenant en position de prouver l'estimation de Weyl de la fonction  $N(\lambda, h)$ . L'idée générale consiste à utiliser le principe du min-max et à transférer des informations connus sur le Laplacien sur le tore vers l'opérateur  $M_h$  via l'inégalité variationnelle (4.2.26). D'après le principe du min-max, il suffit de trouver un sous-espace  $F$  de  $L^2(\Omega)$ , de codimension  $N = O((1 + \lambda h^{-2})^{\frac{d}{2}})$  tel que pour tout  $u \in F$ , on ait

$$\mathcal{E}_h^\Omega(u) \geq \lambda \|u\|_{L^2(\Omega)}^2. \quad (4.2.28)$$

Or, il est assez facile de déduire des propriétés de  $\Gamma_d$  qu'il existe une constante  $c > 0$  indépendante de  $h$  et  $\lambda$ , telle que

$$\mathcal{E}_h^\Pi(v) \geq \min(c, \lambda) \|v\|_{L^2(\Pi)}^2 \quad (4.2.29)$$

pour tout  $v \in F^\Pi = \{v \in L^2(\Pi), c_k(v) = 0, \forall |k|^2 \leq \lambda h^{-2}\}$ . En utilisant le Lemme 4.2.3, on construit facilement un sous espace  $F$  de codimension  $O((1 + \lambda h^{-2})^{\frac{d}{2}})$  tel que 4.2.28 est vérifiée pour tout  $u \in F$ , ce qui prouve l'estimation de Weyl.

## 4.2.2 Estimations de variation totale

Comme dans le cas d'une variété compacte sans bord, on peut montrer la convergence en variation totale des itérés du noyau de Metropolis vers la mesure stationnaire associée.

**Théorème 4.2.4** *Supposons que  $\rho$  vérifie les hypothèses du Théorème 4.2.1. Il existe des constantes  $C_3, C_4 > 0$ , telles qu'on a l'estimation suivante pour tout  $n \in \mathbb{N}$*

$$\sup_{x \in \Omega} \|M_h^n(x, dy) - \rho(y)dy\|_{TV} \leq C_4 e^{-ng(h, \rho)}. \quad (4.2.30)$$

La stratégie générale de preuve de ce résultat est proche de celle employée dans le cas d'une variété compacte. On utilise la décomposition spectrale de  $M_h$  et des informations sur la répartition des valeurs propres combinées avec une borne a priori sur les fonctions propres. Dans le cas présent d'un ouvert peu régulier, les estimations des fonctions propres que nous avons prouvées sont moins bonnes que dans le cas d'une variété compacte et les injections de Sobolev ne fournissent pas une borne optimale. Pour contrebalancer cette perte, et obtenir une estimation convenable des projecteurs spectraux, nous utiliserons des estimations de Nash. Pour une introduction à ces inégalités dans un contexte probabiliste, on renvoie à [DSC96] et [SC97]

La première étape de la preuve consiste à établir une estimation des fonctions propres de  $M_h$ . D'après le Théorème 4.2.1, on sait que le spectre de  $M_h$  est discret près de 1 et que 1 est valeur propre simple. On notera donc  $1 = \tilde{\mu}_0(h) > \tilde{\mu}_1(h) \geq \dots \tilde{\mu}_k(h) \geq \dots$  la suite décroissante des valeurs propres de  $M_h$  et  $\tilde{\nu}_{j,h} = \frac{1 - \tilde{\mu}_j(h)}{h^2}$ . Pour  $\alpha > 0$ , on notera  $E_\alpha$  le sous espace de  $L^2(\Omega)$  engendré par les fonctions propres  $\tilde{e}_{j,h}$  associées aux  $\tilde{\mu}_j(h) \geq 1 - h^{2-\alpha}$ . Pour  $\alpha \leq 2$ , l'estimation de Weyl ci-dessus montre que cet espace est de dimension inférieure à  $Ch^{-d\alpha/2}$ .

**Lemme 4.2.5** *Il existe  $\delta_0 \in ]0, 1/2[$  tel que toute fonction propre  $T_h(u) = \lambda u$  associée à  $\lambda \in [1 - \delta_0, 1]$  vérifie l'estimation*

$$\|u\|_{L^\infty} \leq C_2 h^{-d/2} \|u\|_{L^2}. \quad (4.2.31)$$

*De plus il existe  $\alpha > 0$ ,  $p > 2$  et  $C > 0$  indépendants de  $h$  tels que pour tout  $u \in E_\alpha$ , on ait l'estimation suivante :*

$$\|u\|_{L^p}^2 \leq Ch^{-2} ((\mathcal{E}_h^\Omega(u) + h^2 \|u\|_{L^2}^2)). \quad (4.2.32)$$

*Preuve.* La preuve de (4.2.31) est élémentaire, il suffit de prendre  $\delta_0$  assez petit pour que  $\lambda$  n'appartienne pas à l'image de  $m_h$  et d'écrire

$$u(x) = \frac{1}{\lambda - m_h(x)} \int_{\Omega} h^{-d} \varphi\left(\frac{x-y}{h}\right) \min\left(\frac{\rho(y)}{\rho(x)}, 1\right) u(y) dy.$$

Un simple Cauchy-Schwartz fournit l'estimation souhaitée.

Passons à la preuve de (4.2.32), et considérons  $u \in E_\alpha$  tel que  $h^{-2}((\mathcal{E}_h^\Omega(u) + h^2 \|u\|_{L^2}^2) \leq 1$ . On doit montrer que pour  $\alpha$  et  $p$  assez petits,  $u$  est borné dans  $L^p(\Omega)$ .

En utilisant la définition des troncatures basse-haute fréquence du Lemme 4.2.3, on montre facilement que l'opérateur  $v \mapsto v_L$  est bornée uniformément par rapport à  $h$  sur tous les espaces  $L^q$  for  $1 \leq q \leq \infty$ .

On écrit ensuite  $u = u_L + u_H$  avec  $\|u_L\|_{H^1} = O(1)$  et  $\|u_H\|_{L^2} = O(h)$ . Par injection de Sobolev, on a pour  $p < \frac{2d}{d-2}$ ,  $\|u_L\|_{L^p} = O(1)$ .

Par ailleurs, on déduit du Lemme 4.2.3

$$h^{-2} \mathcal{E}_h^\Pi(E(e_{j,h})) \leq C_0 \left(1 + \frac{1 - \tilde{\mu}_j(h)}{h^2}\right) \quad (4.2.33)$$

dont on déduit

$$h^{-2}\|E(e_{j,h})_H\|_{L^2}^2 \leq C_0(1+h^{-\alpha}). \quad (4.2.34)$$

En prenant  $\alpha \leq 1$ , il vient  $\|E(e_{j,h})_H\|_{L^2} \leq Ch^{1/2}$ . Comme par ailleurs  $\|e_{j,h}\|_{L^\infty} \leq Ch^{-d/2}$ , en utilisant la définition de la troncature en fréquence, il vient

$$\|E(e_{j,h})_H\|_{L^\infty} \leq \|E(e_{j,h})\|_{L^\infty} + \|E(e_{j,h})_L\|_{L^\infty} \leq C\|E(e_{j,h})\|_{L^\infty} \leq Ch^{-d/2}.$$

En interpolant, on trouve  $p > 2$  tel que

$$\|E(e_{j,h})_H\|_{L^p} \leq C_0h^{1/4}. \quad (4.2.35)$$

En décomposant  $u \in E_\alpha$  sur la base des  $e_j(h)$ ,  $\tilde{\mu}_j(h) \geq 1 - h^{2-\alpha}$ , et en utilisant la borne sur la dimension de  $E_\alpha$ , on montre facilement que  $\|u_H\|_{L^p} \leq Ch^{1/4}h^{-d\alpha/4}$ , ce qui achève la preuve du lemme en prenant  $\alpha$  petit.  $\square$

Passons maintenant à la preuve de l'estimation de variation totale. On utilise à nouveau la décomposition spectrale de  $M_h$ . On a  $M_h - \Pi_0 = M_{h,1} + M_{h,2} + M_{h,3}$  avec

$$\begin{aligned} M_{h,1}(x,y) &= \sum_{\tilde{\nu}_1(h) \leq \tilde{\nu}_{j,h} \leq h^{-\alpha}} (1 - h^2\tilde{\nu}_{j,h})\tilde{e}_{j,h}(x)\tilde{e}_{j,h}(y), \\ M_{h,2}(x,y) &= \sum_{h^{-\alpha} < \tilde{\nu}_{j,h} \leq h^{-2}\delta_0} (1 - h^2\tilde{\nu}_{j,h})\tilde{e}_{j,h}(x)\tilde{e}_{j,h}(y), \\ M_{h,3} &= M_h - \Pi_0 - M_{h,1} - M_{h,2}. \end{aligned} \quad (4.2.36)$$

On a évidemment  $M_h^n - \Pi_0 = M_{h,1}^n + M_{h,2}^n + M_{h,3}^n$ , et l'on va estimer chacun des termes séparément. On déduit du Lemme 4.2.5 que pour  $j = 1, 2, 3$ , on a :

$$\|M_{j,h}^n\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq Ch^{-3d/2} \quad (4.2.37)$$

et l'on a l'estimation évidente :

$$\|M_{3,h}^n\|_{L^\infty \rightarrow L^2} \leq \|M_{3,h}^n\|_{L^2 \rightarrow L^2} \leq (1 - \delta_0)^n,$$

Par ailleurs, on peut décomposer  $M_h$  en  $M_h = m_h + R_h$  avec

$$\begin{aligned} \|m_h\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} &\leq \gamma < 1, \\ \|R_h\|_{L^2 \rightarrow L^\infty} &\leq C_0h^{-d/2}. \end{aligned} \quad (4.2.38)$$

En combinant ces estimations, on montre qu'il existe des constantes  $C > 0$  et  $\mu > 0$ , telles que

$$\|M_{3,h}^n\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq Ce^{-\mu n}, \quad \forall h, \quad \forall n \geq 1/h, \quad (4.2.39)$$

Par suite, le terme  $M_{3,h}^n$  est négligeable.

On traite ensuite la contribution de  $M_{2,h}^n$ . On a

$$M_{h,2}^n(x,y) = \sum_{h^{-\alpha} < \lambda_{j,h} \leq h^{-2}\delta_0} (1 - h^2\lambda_{j,h})^n e_{j,h}(x)e_{j,h}(y) \quad (4.2.40)$$

On déduit donc de l'estimation (4.2.31) et de l'estimation de Weyl que :

$$\|M_{2,h}^n\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq Ch^{-3d/2}(1 - h^{2-\alpha})^n \leq C_\alpha e^{-\frac{nh^{2-\alpha}}{2}} \quad (4.2.41)$$

pour  $n \geq h^{-2+\alpha/2}$ .

Il nous reste donc à estimer la norme de  $M_{h,1}^n$  opérant entre  $L^2$  et  $L^\infty$ . Par dualité, il s'agit de montrer que pour tout  $g \in L^1(\Omega)$ , on a  $\|M_{h,1}^n g\|_{L^2} \leq C\|g\|_{L^1}$  pour un certain  $q \leq h^{-2}$  assez grand. En combinant (4.2.32) et l'inégalité d'interpolation  $\|u\|_{L^2}^2 \leq \|u\|_{L^p}^{\frac{p}{p-1}} \|u\|_{L^1}^{\frac{p-2}{p-1}}$ , on obtient l'inégalité de Nash suivante :

$$\|u\|_{L^2}^{2+1/D} \leq Ch^{-2} (\|u\|_{L^2}^2 - \|T_h u\|_{L^2}^2 + h^2 \|u\|_{L^2}^2) \|u\|_{L^1}^{1/D}, \quad \forall u \in E_\alpha, \quad (4.2.42)$$

avec  $1/D = 2 - 4/p > 0$ .

Des estimations (4.2.39) et (4.2.41), combinées avec l'identité  $M_h^n - \Pi_0 = M_{h,1}^n + M_{h,2}^n + M_{h,3}^n$ , on déduit que

$$\|M_{1,h}^n\|_{L^1 \rightarrow L^1} = \|M_{1,h}^n\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq C, \quad \forall h, \quad \forall n \geq h^{-2+\alpha/2}, \quad (4.2.43)$$

Soit  $g \in L^2(\Omega)$  tel que  $\|g\|_{L^1} = 1$ . Fixons  $p \simeq h^{-2+\alpha/2}$  et considérons la suite  $(c_n)_{n \in \mathbb{N}}$ , définie par

$$c_n = \|T_{1,h}^{n+p} g\|_{L^2}^2. \quad (4.2.44)$$

Alors,  $0 \leq c_{n+1} \leq c_n$ , et l'on déduit des équations (4.2.42) and (4.2.43), que

$$\begin{aligned} c_n^{1+\frac{1}{2D}} &\leq Ch^{-2} (c_n - c_{n+1} + h^2 c_n) \|T_{1,h}^{n+p} g\|_{L^1}^{1/D} \\ &\leq CC_2^{1/D} h^{-2} (c_n - c_{n+1} + h^2 c_n). \end{aligned} \quad (4.2.45)$$

De cette inégalité, on déduit qu'il existe  $A \simeq CC_2 \sup_{0 \leq n \leq h^{-2}} (2+n)(1+h^2 - (1 - \frac{1}{n+2})^{2D})$  dépendant seulement de  $C$ ,  $C_2$ ,  $D$  et tel que pour tout  $0 \leq n \leq h^{-2}$ , on a  $c_n \leq (\frac{Ah^{-2}}{1+n})^{2D}$ . Par suite, il existe une constante  $C_0$  indépendante de  $h$  telle que pour  $N \simeq h^{-2}$ , on a  $c_N \leq C_0$ . On renvoie au cours de G. Lebeau [Leb] pour le détails de ces calculs. On en déduit que

$$\|T_{1,h}^{N+p}\|_{L^1 \rightarrow L^2} \leq C_0 \quad (4.2.46)$$

et en combinant cette estimation avec l'inégalité

$$\|T_{1,h}^n\|_{L^2 \rightarrow L^2} \leq (1 - h^2 \tilde{\nu}_{j,h})^n, \quad (4.2.47)$$

on obtient

$$\|T_{1,h}^n\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq C_0 e^{-(n-h^{-2})h^2 \lambda_{1,h}} = C_0 e^{\lambda_{1,h}} e^{-ng(h)}, \quad \forall h, \quad \forall n \geq h^{-2}, \quad (4.2.48)$$

ce qui achève la preuve du Théorème 4.2.4.

### 4.2.3 Étude précisée du spectre dans le cas régulier

On suppose désormais que  $\rho \in C^\infty(\overline{\Omega})$ . L'objet de cette section est de décrire plus précisément les valeurs propres  $\tilde{\mu}_j(h)$  de l'opérateur  $M_h$ .

On rappelle que l'opérateur limite  $L_\rho$  est défini par les équations (3.4.17) et (3.4.19). Donnons maintenant quelques précisions sur la notion de dérivée normale utilisée dans (3.4.19). On note  $\vec{n}(x)$  le vecteur unité rentrant à  $\partial\Omega$  au point  $x$ . La frontière de  $\partial\Omega$  étant seulement Lipschitz la normale  $\vec{n}(x)$  est bien définie pour presque tout  $x \in \partial\Omega$  (ici la notion de "presque tout" est à comprendre par rapport à la mesure  $\sigma$  induite sur la frontière). En utilisant un recouvrement convenable de  $\Omega$ , on peut définir un opérateur de trace  $\gamma_0 : H^1(\Omega) \mapsto L^2(\partial\Omega)$ . On note cet

opérateur  $\gamma_0(u) = u|_{\partial\Omega}$ . L'espace défini par  $H^{1/2}(\partial\Omega) = \text{Im}(\gamma_0)$  ne dépend pas du recouvrement utilisé pour définir  $\gamma_0$ , et muni de la norme  $\|u\|_{H^{1/2}} = \inf\{\|v\|_{H^1}, \gamma_0(v) = u\}$  c'est un espace de Banach réflexif (dans le cas où la frontière de  $\Omega$  est régulière, il correspond avec l'espace  $H^{1/2}$  usuel). On peut donc définir  $H^{-1/2}(\partial\Omega) = H^{1/2}(\partial\Omega)^*$  et pour  $u \in H^{-1/2}(\partial\Omega)$ , le support de  $u$  peut être défini de manière standard. L'opérateur de trace agissant sur les champs  $u \in (L^2)^d$  tels que  $\text{div}(u) \in L^2$ ,

$$\gamma_1 : \left\{ u \in (L^2(\Omega))^d, \text{div}(u) \in L^2(\Omega) \right\} \rightarrow H^{-1/2}(\partial\Omega), \quad (4.2.49)$$

est alors défini par la formule

$$\int_{\Omega} \text{div}(u)(x)v(x)dx = - \int_{\Omega} u(x) \cdot \nabla v(x)dx - \int_{\partial\Omega} \gamma_1(u)v|_{\partial\Omega}d\sigma(x). \quad (4.2.50)$$

En particulier, si  $u \in H^1(\Omega)$  vérifie  $-\Delta u = \text{div}\nabla u \in L^2(\Omega)$ , on peut définir  $\partial_n u|_{\partial\Omega} = \gamma_1(\nabla u) \in H^{-1/2}(\partial\Omega)$  et l'ensemble  $D(L_\rho)$  décrit en (3.4.19) est bien défini. De l'équation (4.2.50) on déduit que pour toute fonction  $u \in H^1(\Omega)$  telle que  $\Delta u \in L^2$  et pour tout  $v \in H^1(\Omega)$ , on a

$$\langle (L_\rho + 1)u, v \rangle_{L^2(\Omega, d\pi)} = \langle \nabla u, \nabla v \rangle_{L^2(\Omega, d\pi)} + \langle \partial_n u, \rho v \rangle_{H^{-1/2}(\partial\Omega), H^{1/2}(\partial\Omega)} + \langle u, v \rangle_{L^2(\Omega, d\pi)}. \quad (4.2.51)$$

On en déduit que  $L_\rho$  est la réalisation autoadjointe de la forme de Dirichlet

$$\int_{\Omega} |\nabla u(x)|^2 \rho(x)dx. \quad (4.2.52)$$

Un argument standard [RS78, Sects. 13, 14] à partir des injections de Sobolev montre que  $L_\rho$  est à résolvante compacte. On note son spectre  $\lambda_0 = 0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots$ . On remarque que  $\lambda_0 < \lambda_1$  car le noyau  $\text{Ker}L_\rho$  est engendré par la fonction constante égale à 1.

Afin d'énoncer notre théorème nous avons besoin de la définition suivante :

**Définition 4.2.6** *Soit  $\Omega$  un ouvert Lipschitz de  $\mathbb{R}^d$ . On dit que son bord  $\partial\Omega$  est quasi-régulier s'il peut s'écrire  $\partial\Omega = \Gamma_{\text{reg}} \cup \Gamma_{\text{sing}}$ ,  $\Gamma_{\text{reg}} \cap \Gamma_{\text{sing}} = \emptyset$  où  $\Gamma_{\text{reg}}$  est la réunion d'hypersurfaces fermées, relativement ouvertes dans  $\partial\Omega$ , et  $\Gamma_{\text{sing}}$  est un fermé de  $\mathbb{R}^d$  tel que*

$$v \in H^{-1/2}(\partial\Omega) \quad \text{and} \quad \text{supp}(v) \subset \Gamma_{\text{sing}} \implies v = 0. \quad (4.2.53)$$

On remarque que (4.2.53) est trivialement satisfaite si  $\partial\Omega$  est régulier. En effet, il suffit de prendre  $\Gamma_{\text{sing}} = \emptyset$ .

Plus généralement, supposons que  $\Omega$  est un ouvert Lipschitz de  $\mathbb{R}^d$  tel que  $\partial\Omega = \Gamma_{\text{reg}} \cup \Gamma_{\text{sing}}$ ,  $\Gamma_{\text{reg}} \cap \Gamma_{\text{sing}} = \emptyset$ , avec  $\Gamma_{\text{reg}}$  hypersurface régulière de  $\mathbb{R}^d$ , relativement ouverte dans  $\partial\Omega$ , et  $\Gamma_{\text{sing}}$  fermé de  $\mathbb{R}^d$  tel que  $\Gamma_{\text{sing}} = \cup_{j \geq 2} S_j$  où les  $S_j$  sont des sous-variétés disjointes de  $\mathbb{R}^d$  vérifiant

$$\text{codim}_{\mathbb{R}^d} S_j \geq j, \quad \cup_{k \geq j} S_k = \overline{S_j}, \quad (4.2.54)$$

Alors, la frontière de  $\Omega$  est quasi-régulière. En effet, si  $v \in H^{-1/2}(\partial\Omega)$  est supporté dans une sous-variété  $S$  de codimension (dans  $\mathbb{R}^d$ )  $\geq 2$  au voisinage d'un point  $x_0$ , alors  $v = 0$  près de  $x_0$ . Ceci découle du fait que si  $S$  est de codimension  $\geq 1$  dans  $\partial\Omega$ , et si  $u \in \mathcal{D}'(\mathbb{R}^p)$  vérifie  $u \in H_{\text{loc}}^{-1/2}(\mathbb{R}^p)$  et  $\text{supp}(u) \subset \{x_1 = 0\}$ , alors  $u = 0$ .

Un exemple concret d'ouvert quasi régulier est donné par le cube dans  $\mathbb{R}^d$ .



**Théorème 4.2.7** Soit  $\Omega$  un ouvert de  $\mathbb{R}^d$  borné et connexe tel que  $\partial\Omega$  est Lipschitz et quasi-régulier. On suppose que la densité  $\rho$  est régulière jusqu'à la partie  $\Gamma_{\text{reg}}$  de la frontière  $\partial\Omega$ , alors pour tout  $K \in \mathbb{N}$  et tout  $\epsilon > 0$  assez petit il existe  $h_1 > 0$  tel que pour tout  $h \in ]0, h_1]$ , on a

$$\left| \frac{1 - \tilde{\mu}_k(h)}{h^2} - \frac{\lambda_k}{2(d+2)} \right| \leq \epsilon \quad (4.2.55)$$

pour tout  $k = 0, \dots, K$ .

Ce résultat est de la même veine que le Théorème 4.1.1. On remarque cependant que l'approximation des valeurs propres de  $|\Delta_h^M| = 2(d+2)\frac{1-M_h}{h^2}$  par les valeurs propres d'un opérateur modèle (ici  $L_\rho$ ) est moins bonne ( $o(1)$  contre  $O(h^2)$ ). Ceci tient au fait qu'on utilise pas ici d'analyse microlocale pour décrire l'opérateur  $|\Delta_h^M|$ . Une telle description près de la frontière nécessiterait l'emploi de techniques assez lourdes, en particulier lorsque la frontière  $\partial\Omega$  n'est pas lisse. De plus, pour ce qui est de la convergence vers l'équilibre, l'estimation en  $o(1)$  est suffisante.

Les principales étapes de la preuve de ce résultat sont les suivantes. On commence par montrer que les opérateurs  $|\Delta_h^M|$  et  $L_\rho$  sont proches lorsqu'on les évalue sur des fonctions régulières supportées loin de la partie singulière du bord. On démontre ensuite que cet ensemble de fonctions est dense dans  $H^1(\Omega)$ . En utilisant ces résultats, le principe du min-max et le résultat de compacité découlant de la décomposition "basse-haute" fréquence du Lemme 4.2.3, on obtient la description annoncée.

Donnons maintenant quelques détails supplémentaires. On introduit l'ensemble

$$\mathcal{D}_0 = \{\theta \in C^\infty(\overline{\Omega}), \theta = 0 \text{ près de } \Gamma_{\text{sing}} \text{ et } \partial_n \theta|_{\Gamma_{\text{reg}}} = 0\}. \quad (4.2.56)$$

On commence par démontrer le Lemme suivant (on rappelle que  $|\Delta_h^M| = 2(d+2)\frac{1-M_h}{h^2}$ ) :

**Lemme 4.2.8** Soit  $\theta \in \mathcal{D}_0$ , alors

$$|\Delta_h^M|(\theta) = L_\rho(\theta) + r, \quad (4.2.57)$$

avec  $\|r\|_{L^2(\Omega)} = O(h^{1/2})$ .

*Preuve.* Afin de simplifier l'exposé des idées principales, nous supposons que  $\rho = 1$ . On renvoie à [DLM08] pour le cas général. Pour  $\theta \in \mathcal{D}_0$  et  $x \in \Omega$ , on a

$$(1 - M_h)\theta(x) = \frac{1}{\alpha_d h^d} \int_{y \in \Omega} (\theta(x) - \theta(y)) \mathbb{1}_{|x-y| < h} dy \quad (4.2.58)$$

En effectuant le changement de variable  $y = x + hz$  et en utilisant la formule de Taylor, il vient

$$\begin{aligned} (1 - M_h)\theta(x) &= -\frac{h}{\alpha_d} \int_{A(x,h)} z \cdot \nabla \theta(x) dz - \frac{h^2}{2\alpha_d} \int_{A(x,h)} d_x^2 \theta(z, z) dz + r_0(x) \\ &:= f_1(x) + f_2(x) + r_0(x) \end{aligned} \quad (4.2.59)$$

avec  $\|r\|_{L^\infty} = O(h^3)$  et  $A(x, h) = \{z \in \mathbb{R}^d, |z| < 1 \text{ et } x + hz \in \Omega\}$ . On calcule ensuite les termes  $f_j$  plus précisément. Selon que  $x$  est proche du bord, ou pas le calcul diffère légèrement. On introduit la fonction de troncature  $\chi(x) = \mathbb{1}_{\text{dist}(x, \partial\Omega) < 2h}$ . Pour  $x \in \text{supp}(1 - \chi)$  l'ensemble sur



lequel on intègre est symétrique :  $A(x, h) = \{z \in \mathbb{R}^d, |z| < 1\}$ . Par suite, un argument de parité montre que

$$(1 - \chi)f_1 = 0 \text{ et } (1 - \chi)f_2 = -(1 - \chi)\frac{h^2}{2(d+2)}\Delta\theta. \quad (4.2.60)$$

Par ailleurs, comme  $\|f_2\|_{L^\infty} = O(h^2)$ , on a  $\|\chi f_2\|_{L^2(\Omega)} = O(h^{5/2})$  et par conséquent

$$f_2 = -\frac{h^2}{2(d+2)}\Delta\theta + r_1 \quad (4.2.61)$$

avec  $\|r_1\|_{L^2} = O(h^{5/2})$ . Il reste donc à estimer  $\chi f_1$ . Soit  $x_0$  un point de la frontière. Quitte à redresser le bord de  $\Omega$  localement, on peut supposer que près de  $x$ , la frontière de  $\Omega$  est donnée par  $\partial\Omega = \{x_1 > 0\}$  et comme  $\theta$  est supportée loin de  $\Gamma_{sing}$ , la normale au bord est simplement  $\vec{n} = (-1, 0, \dots, 0)$ .

Dans ces conditions, on a alors pour  $x$  à distance  $2h$  de  $x_0$  :

$$f_1(x) = -\frac{h}{\alpha_d} \sum_{j=1}^d \int_{x_1+h z_1 > 0, |z| < 1} z_j \partial_j \theta(x) dz \quad (4.2.62)$$

Les termes d'indices  $j \geq 2$  s'annulent pour des raisons de parité. Le terme d'indice  $j = 1$  est d'ordre  $O(h^2)$  car  $\partial_1 \theta(x_0) = 0$  et  $|x - x_0| < h$ . Ceci montre que  $\|\chi f_1\|_{L^\infty} = O(h^2)$  et comme  $\chi$  est supportée dans une bande de taille  $h$  autour de  $\partial\Omega$ , il suit  $\|\chi f_1\|_{L^2} = O(h^{5/2})$ .  $\square$

On montre ensuite le

**Lemme 4.2.9** *L'ensemble  $\mathcal{D}_0$  est dense dans  $H^1(\Omega)$ .*

*Preuve.* Il s'agit de montrer que l'orthogonal de  $\mathcal{D}_0$  dans  $H^1(\Omega)$  est réduit à 0. Partant de  $f$  orthogonale à  $\mathcal{D}_0$ , on montre facilement que

$$(L_\rho + 1)f = 0 \quad (4.2.63)$$

au sens des distributions. Comme  $L_\rho$  est strictement positif, il suffit de montrer que  $f$  appartient au domaine de  $L_\rho$ . On a évidemment  $\Delta f \in L^2$ . De plus, en utilisant la formule de Green, on montre que  $\partial_n f|_{\Gamma_{reg}} = 0$ . Donc  $\partial_n f|_{\partial\Omega} \in H^{-1/2}$  est supportée dans  $\Gamma_{sing}$  et comme  $\Omega$  est quasi-régulier, on en déduit  $\partial_n f|_{\partial\Omega} = 0$ .  $\square$

Passons maintenant à la preuve du Théorème 4.2.7. On commence par remarquer que si  $\tilde{\nu}_k(h) = 2(d+2)\frac{1-\tilde{\mu}_k(h)}{h^2} \in [0, M]$  et  $\psi_h \in L^2(\rho)$  vérifient  $\|\psi_h\|_{L^2} = 1$ , et  $|\Delta_h^M| \psi_h = \tilde{\nu}_k(h)\psi_h$ , où  $|\Delta_h^M|$  est défini par (3.4.11), alors en vertu du Lemme 4.2.3, la famille  $(\psi_h)_{h \in ]0,1]}$  est relativement compacte dans  $L^2(\rho)$ . Quitte à extraire une sous suite  $h_k$ , on peut supposer que  $\tilde{\nu}_k(h) \rightarrow \nu$  et  $\psi_h \rightarrow \psi$  dans  $L^2(\rho)$ ,  $\|\psi\|_{L^2} = 1$ . De plus, en examinant la décomposition "basse-haute fréquence", on voit que la limite  $\psi$  appartient à  $H^1(\Omega)$ .

Etant donné  $\theta \in \mathcal{D}_0$  et puisque  $|\Delta_h^M|$  est autoadjoint sur  $L^2(\Omega, \rho(x)dx)$ , on déduit du Lemme 4.2.8 que

$$0 = \langle (|\Delta_h^M| - \tilde{\nu}_k(h))\psi_h, \theta \rangle_{L^2(\rho)} = \langle \psi_h, (L_\rho - \tilde{\nu}_k(h))\theta \rangle_{L^2(\rho)} + O(h^{1/2}). \quad (4.2.64)$$

En prenant la limite  $h \rightarrow 0$  on obtient  $\langle \psi, (L_\rho - \nu)\theta \rangle_{L^2(\rho)} = 0$  pour tout  $\theta \in \mathcal{D}_0$ . On en déduit aisément que  $\psi \in D(L_\rho)$  et par conséquent  $\nu$  est valeur propre de  $L_\rho$ . On en déduit que pour tout  $\epsilon > 0$  et pour tout  $k \in \mathbb{N}$ , il existe  $j(k) \in \mathbb{N}$  et  $h_0 > 0$  tel que pour  $h \in ]0, h_0]$ , on a

$$|\tilde{\nu}_k(h) - \lambda_{j(k)}| < \epsilon. \quad (4.2.65)$$

De plus, la compacité dans  $L^2$  de la suite  $\psi_h$ , montre que  $j(k) \geq k$  (autrement dit le nombre de valeurs propres  $\tilde{\nu}_k(h)$  proche de  $\lambda_k$  est inférieur à la multiplicité de  $\lambda_k$ ). Il reste donc à montrer que  $j(k) \leq k$ .

Il s'agit de montrer que pour tout  $j \in \mathbb{N}$ , il existe  $k \in \mathbb{N}$  tel que  $|\tilde{\nu}_k(h) - \lambda_j| < \epsilon$ . On considère  $e_j \in L^2$ , de norme 1 et tel que  $L_\rho e_j = \lambda_j e_j$ . Grâce au Lemme 4.2.9, pour tout  $\alpha > 0$  il existe  $e_{j,\alpha} \in \mathcal{D}_0$  tel que  $\|e_j - e_{j,\alpha}\|_{H^1} \leq \alpha$ . On déduit alors du Lemme 4.2.8 que

$$(|\Delta_h^M| - \lambda_j)e_{j,\alpha} = O(\alpha) + O_\alpha(h^{1/2}) \quad (4.2.66)$$

dans  $L^2$ . En utilisant cette approximation et le principe du min-max, on montre que  $j(k) \geq k$ . On renvoie à [DLM08] pour les détails.

#### 4.2.4 Le problème historique

Dans cette dernière section, nous appliquons les méthodes précédentes au problème d'échantillonnage qui a motivé les travaux de Metropolis [MRR<sup>+</sup>53]. L'algorithme utilisé n'est pas tout à fait du type décrit précédemment, mais plutôt de type  $N$ -corps.

On suppose à nouveau que  $\Omega$  est un ouvert borné connexe de  $\mathbb{R}^d$  (avec  $d \geq 2$ ) dont la frontière est Lipschitz et quasi-régulière. On fixe un entier  $N \in \mathbb{N}$ ,  $N \geq 2$  ainsi que  $\epsilon > 0$ . L'espace de configuration  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$  que nous considérons est l'ouvert borné de  $\mathbb{R}^{Nd}$ , défini par

$$\mathcal{O}_{N,\epsilon} = \{x = (x_1, \dots, x_N) \in \Omega^N, \forall 1 \leq i < j \leq N, |x_i - x_j| > \epsilon\}.$$

Cet ensemble modélise  $N$  boules disjointes de rayon  $\epsilon/2$  dont les centres se trouvent dans  $\Omega$ . La topologie de cet ensemble et la géométrie de son bord sont en général compliquées à comprendre. Comme la dimension est supposée plus grande que 2, cet ensemble sera clairement non vide et connexe pourvu que l'on choisisse  $\epsilon$  assez petit.

On introduit ensuite le noyau

$$K_{h,N}(x, dy) = \frac{1}{N\alpha_d h^d} \sum_{j=1}^N \delta_{x_1} \otimes \dots \otimes \delta_{x_{j-1}} \otimes \mathbb{1}_{|x_j - y_j| < h} dy_j \otimes \delta_{x_{j+1}} \otimes \dots \otimes \delta_{x_N}, \quad (4.2.67)$$

et l'opérateur de Metropolis associé sur  $L^2(\mathcal{O}_{N,\epsilon})$

$$\widetilde{M}_h(u)(x) = m_h(x)u(x) + \int_{\mathcal{O}_{N,\epsilon}} u(y)K_{h,N}(x, dy), \quad (4.2.68)$$

avec

$$m_h(x) = 1 - \int_{\mathcal{O}_{N,\epsilon}} K_{h,N}(x, dy). \quad (4.2.69)$$

Le noyau de Metropolis ci-dessus est associé à l'algorithme suivant. On part d'une configuration arbitraire  $X^1 = (x_1^1, \dots, x_N^1) \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}$  et on itère le procédé suivant :

- On choisit un des  $N$  disques au hasard, disons le  $k$ ième et on déplace son centre  $x_k^1$  au hasard uniformément dans une boule de rayon  $h$ . On note  $x_k^{1,*}$  sa nouvelle position et  $X^{1,*} = (x_1^1, \dots, x_k^{1,*}, \dots, x_N^1) \in \mathbb{R}^{dN}$  la nouvelle configuration. Si  $X^{1,*} \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}$ , on pose  $X^2 = X^{1,*}$ .

– Si  $X^{1,*} \notin \mathcal{O}_{N,\epsilon}$ , on pose  $X^2 = X^1$  (i.e. on reste au point précédent).  
On fabrique ainsi une suite de points  $X^1, \dots, X^n$ . En pratique, lorsque  $n$  devient grand la répartition des  $X^j$  dans l'ouvert  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$  devient uniforme par rapport à la mesure de Lebesgue.

Nous allons maintenant appliquer les techniques de la section précédente à l'opérateur  $\widetilde{M}_h$ .

Dans un premier temps nous allons montrer (c.f. Proposition 4.2.10) que l'ouvert  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$  est Lipschitz et quasi-régulier pour  $\epsilon > 0$  assez petit. On définit les parties régulières et singulières du bord  $\Gamma_{\text{reg}}$  et  $\Gamma_{\text{sing}}$  de la manière suivante. On note  $\mathbb{N}_N = \{1, \dots, N\}$ . Pour  $x \in \overline{\mathcal{O}}_{N,\epsilon}$  on définit

$$\begin{aligned} R(x) &= \{i \in \mathbb{N}_N, x_i \in \partial\Omega\}, \\ S(x) &= \{\tau = (\tau_1, \tau_2) \in \mathbb{N}_N, \tau_1 < \tau_2 \text{ et } |x_{\tau_1} - x_{\tau_2}| = \epsilon\}, \\ r(x) &= \#R(x), \quad s(x) = \#S(x). \end{aligned} \tag{4.2.70}$$

Les fonctions  $r$  et  $s$  sont semi-continues inférieurement et tout  $x \in \overline{\mathcal{O}}_{N,\epsilon}$  appartient à  $\partial\mathcal{O}_{N,\epsilon}$  ssi  $r(x) + s(x) \geq 1$ . On définit alors

$$\begin{aligned} \Gamma_{\text{reg}} &= \{x \in \overline{\mathcal{O}}_{N,\epsilon}, s(x) = 1 \text{ and } r(x) = 0\} \\ &\cup \{x \in \overline{\mathcal{O}}_{N,\epsilon}, s(x) = 0, R(x) = \{j_0\} \text{ and } x_{j_0} \in \partial\Omega_{\text{reg}}\} \end{aligned} \tag{4.2.71}$$

et  $\Gamma_{\text{sing}} = \partial\mathcal{O}_{N,\epsilon} \setminus \Gamma_{\text{reg}}$ . L'ensemble  $\Gamma_{\text{sing}}$  est clairement fermé et  $\Gamma_{\text{reg}}$  est la réunion d'hypersurfaces disjointes dans  $\mathbb{R}^{Nd}$ . On montre dans [DLM08] la proposition suivante :

**Proposition 4.2.10** *Soit  $\epsilon > 0$  tel que  $N\epsilon$  est assez petit, alors l'ensemble  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$  est connexe, Lipschitz et quasi-régulier.*

L'hypothèse  $N\epsilon$  petit signifie que la somme des diamètres des boules est petite devant le diamètre de l'ouvert. Si l'on suppose seulement que ces boules ont une faible densité dans  $\Omega$  (c'est à dire  $N\epsilon^d$  petit) alors l'ouvert  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$  n'est ni nécessairement connexe (c.f. [Kah]), ni Lipschitz. Par exemple, si  $\Omega = ]0, 1[^2$  alors  $x = (x_1, \dots, x_N)$ ,  $x_j = ((j-1)\epsilon, 0)$ ,  $j = 1, \dots, N$  avec  $\epsilon = \frac{1}{N-1}$  est un point de la frontière  $\partial\mathcal{O}_{N,\epsilon}$ . Par suite,  $\partial\mathcal{O}_{N,\epsilon}$  n'est pas Lipschitz au voisinage de  $x$  : sinon, on pourrait trouver  $\nu_j = (a_j, b_j)$  tel que  $(x_1 + t\nu_1, \dots, x_N + t\nu_N) \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}$  pour  $t > 0$  assez petit. Ceci impliquerait  $a_1 > 0, a_{j+1} > a_j$  et  $a_N < 0$  ce qui est impossible.

En vertu de la Proposition 4.2.10, on peut considérer le Laplacien avec condition de Neumann  $|\Delta|_N$  sur  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$  :

$$\begin{aligned} |\Delta|_N &= -\frac{\alpha_d}{2N}\Delta, \\ D(|\Delta|_N) &= \{u \in H^1(\mathcal{O}_{N,\epsilon}), -\Delta u \in L^2(\mathcal{O}_{N,\epsilon}), \partial_n u|_{\partial\mathcal{O}_{N,\epsilon}} = 0\}. \end{aligned} \tag{4.2.72}$$

On note à nouveau  $0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \lambda_2 < \dots$  le spectre de  $|\Delta|_N$ . On a le théorème suivant, qui établit un lien entre le spectre de  $M_h$  et celui de  $|\Delta|_N$  :

**Théorème 4.2.11** *Soit  $N \geq 2$  un entier fixé et soit  $\epsilon > 0$  assez petit pour que les Propositions 4.2.10 et 4.2.12 (voir ci dessous) soient vraies. Soient  $K > 0$  et  $\beta > 0$  assez petit, alors il existe  $h_0 > 0$ ,  $\delta_0 \in ]0, 1/2[$  et des constantes  $C_i > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$ , on ait :*

*i) Le spectre de  $\widetilde{M}_h$  est contenu dans  $[-1 + \delta_0, 1]$ , 1 est valeur propre simple de  $\widetilde{M}_h$ , et  $\text{Spec}(\widetilde{M}_h) \cap [1 - \delta_0, 1]$  est discret. De plus, si l'on note  $1 = \mu_0(h) > \mu_1(h) \geq \dots \geq \mu_k(h) \geq$  la suite décroissante des valeurs propres de  $\widetilde{M}_h$ , on a*

$$\left| \frac{1 - \mu_k(h)}{h^2} - \frac{\lambda_k}{2(d+2)} \right| \leq \beta \tag{4.2.73}$$

et pour tout  $0 \leq \lambda \leq \delta_0$ , le nombre de valeurs propres de  $\widetilde{M}_h$  dans  $[1 - \lambda, 1]$  comptées avec multiplicité est borné par  $C_1(1 + \lambda h^{-2})^{dN/2}$ .

ii) Le trou spectral  $\tilde{g}(h) := \text{dist}(1, \text{Spec}(\widetilde{M}_h) \setminus \{1\})$  vérifie

$$\lim_{h \rightarrow 0^+} h^{-2} \tilde{g}(h) = \frac{\lambda_1}{2(d+2)} \quad (4.2.74)$$

et on a l'estimation suivante :

$$\sup_{x \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}} \left\| \widetilde{M}_h^n(x, dy) - \frac{dy}{\text{vol}(\mathcal{O}_{N,\epsilon})} \right\|_{TV} \leq C_4 e^{-n\tilde{g}(h)} \quad (4.2.75)$$

pour tout  $n \in \mathbb{N}$ .

L'idée de départ de la preuve de ce résultat est de se ramener au cas d'un algorithme de type "moyenne sur une boule" étudié précédemment. Pour cela, on montre que si l'on itère le noyau  $\widetilde{M}_h(x, dy)$  suffisamment, la mesure obtenue est minorée par un noyau de moyennisation sur une boule centrée en  $x$ .

**Proposition 4.2.12** Soient  $N \in \mathbb{N}$  et  $\epsilon > 0$  tels que  $N\epsilon$  est petit. Il existe  $h_0 > 0, c_0, c_1 > 0$  et  $M \in \mathbb{N}^*$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$ , on a

$$\widetilde{M}_h^M(x, dy) = \mu_h(x, dy) + c_0 h^{-Nd} \mathbb{1}_{|x-y| < c_1 h} dy, \quad (4.2.76)$$

où pour tout  $x \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}$ ,  $\mu_h(x, dy)$  est une mesure de Borel positive.

*Preuve.* Pour  $x, y \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}$ , on note  $\text{dist}(x, y) = \sup_{1 \leq i \leq N} |x_i - y_i|$ . On remarque que la fonction  $m_h$  étant positive, il suffit de minorer une itérée du noyau  $K_{h,N}$ . Plus précisément, il suffit de montrer qu'il existe  $h_0 > 0, c_0, c_1 > 0$  et  $M(N) \in \mathbb{N}^*$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et pour toute fonction mesurable positive  $f$ , on a

$$K_{h,N}^{M(N)}(f)(x) \geq c_0 h^{-Nd} \int_{y \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}, \text{dist}(y,x) \leq c_1 h} f(y) dy. \quad (4.2.77)$$

Par un argument de compacité, il suffit de montrer que pour tout  $x^0 \in \overline{\mathcal{O}_{N,\epsilon}}$ , il existe  $M(N, x^0), r = r(x^0) > 0, c_0 = c_0(x^0) > 0, c_1 = c_1(x^0) > 0, h_0 = h_0(x^0) > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$ ,  $x \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}$  et pour toute fonction positive  $f$ , on a

$$\text{dist}(x, x^0) \leq 2r \implies K_{h,N}^{M(N, x^0)}(f)(x) \geq c_0 h^{-Nd} \int_{y \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}, \text{dist}(y,x) \leq c_1 h} f(y) dy. \quad (4.2.78)$$

Si  $x^0 \in \Omega$  vérifie  $\text{dist}(x^0, \partial\Omega) > r_0$  pour un  $r_0 > 0$  indépendant de  $h$ , alors pourvu que  $Nh \ll r_0$ , on peut prendre  $r = r_0/2$  et  $M = N, c_0 = 1$  et  $c_1 = (\alpha_d N)^{-N}$ .

Si  $x^0$  est proche de la frontière, la situation est un peu plus compliquée. Essentiellement, il faut trouver un ensemble de directions qui permettent de s'éloigner du bord, on itère alors  $N$  fois le noyau, puis on revient près du bord par le chemin initial.

On introduit les cônes entrants : pour  $\nu \in S^{Nd-1}$  et  $\delta \in ]0, 1[$

$$\Gamma_+(\nu, \delta) = \{\xi \in \mathbb{R}^{Nd}, \delta > \langle \xi, \nu \rangle > (1 - \delta)|\xi|\} \quad (4.2.79)$$

Pour  $j = 1, \dots, N$ , on note  $\sigma_j$  l'application de  $\mathbb{R}^d$  dans  $\mathbb{R}^{Nd}$  définie par  $\sigma_j(y) = (0, \dots, y, \dots, 0)$ , où  $y$  est à la  $i$ -ème coordonnée. En étudiant précisément la géométrie du bord de  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$ , on montre le lemme suivant :

**Lemme 4.2.13** *Il existe  $\alpha_0 > 0$  dépendant uniquement de la géométrie de  $\Omega$  tel que pour tout  $N \in \mathbb{N}$  et pour tout  $\epsilon \in ]0, \alpha_0/N]$ , il existe  $\delta_{N,\epsilon} > 0$  et un recouvrement fini  $(U_l)_l$  de  $\overline{\mathcal{O}_{N,\epsilon}}$  tels que pour tout  $l$ , il existe  $j$  et  $\nu \in S^{d-1}$  tels que*

$$x + \sigma_j(\Gamma_+(\nu, \delta_{N,\epsilon})) \subset \mathcal{O}_{N,\epsilon} \quad \forall x \in U_l \cap \mathcal{O}_{N,\epsilon}. \quad (4.2.80)$$

Autrement dit, près tout point  $x^0$ , on peut trouver un disque  $j$  et un cône  $\Gamma_+$  tels que la configuration résultant d'un déplacement du  $j$ -ème disque dans ce cône reste dans l'ouvert de configuration.

La fin de la preuve de la proposition se fait par récurrence sur le nombre  $N$  de disques. Pour  $N = 1$ , il n'y a rien à montrer. Pour  $N \geq 1$  et pour  $x^0$  proche du bord de la frontière de  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$ , grâce au lemme précédent, on peut supposer qu'il existe un ouvert  $U$  contenant  $x^0$ , une direction  $\nu \in S^{d-1}$  et  $\delta > 0$  tels que (4.2.80) est vraie avec  $j = 1$ . On décompose alors  $K_{h,N} = K_{h,N,1} + K_{h,N,>}$  avec

$$K_{h,N,1}f(x) = \frac{h^{-d}}{\alpha_d N} \int_{(y_1, x') \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}} \mathbb{1}_{|x_1 - y_1| < h} f(y_1, x') dy_1. \quad (4.2.81)$$

On note  $G(\nu, \delta) = \{x_1 \in \Gamma_+(\nu, \delta), |x_1| > \frac{\delta}{2}\}$ . A l'aide du Lemme 4.2.13, on montre que pour tout  $\delta' \in ]0, \frac{\delta}{2}[$ , il existe des constantes  $C > 0$ ,  $\alpha > 0$ ,  $h_0 > 0$  et  $r_0 > 0$  telles que  $\forall r \in ]0, r_0]$ ,  $\forall h \in ]0, h_0]$ ,  $\forall x \in U \cap \mathcal{O}_{N,\epsilon}$ ,  $\forall \tilde{x} \in x + h(G(\nu, \delta') \times B(0, r)^{N-1})$  avec  $\tilde{x}' \in \mathcal{O}_{N-1,\epsilon}$ , on a  $\tilde{x} \in \mathcal{O}_{N,\epsilon}$  et

$$K_{h,N,>}f(\tilde{x}) \geq CK_{\alpha h, N-1}(f(\tilde{x}_1, \cdot))(\tilde{x}'), \quad (4.2.82)$$

où l'on note  $\tilde{x} = (\tilde{x}_1, \tilde{x}')$ . Cette inégalité permet de se ramener au cas de  $N - 1$  disques et d'utiliser l'hypothèse de récurrence.  $\square$

Venons en maintenant à la preuve du Théorème 4.2.11. En utilisant le caractère markovien de  $\widetilde{M}_h^M$ , la positivité de  $\mu_h(x, dy)$  et la Proposition 4.2.12, on montre facilement qu'il existe  $\delta'_0 > 0$  tel que pour  $h$  assez petit, on a  $\|\mu_h\|_{L^\infty \rightarrow L^\infty} \leq 1 - \delta'_0$ . Ceci montre que le spectre essentiel de  $\widetilde{M}_h^M$  est contenu dans  $[0, 1 - \delta'_0]$  et donc que le spectre essentiel de  $\widetilde{M}_h$  est contenu dans  $[0, 1 - \delta_0]$  avec  $\delta_0 = 1 - (1 - \delta'_0)^{1/M}$ . De même, on déduit aisément de la Proposition 4.2.12 que  $\text{Spec}(\widetilde{M}_h) \subset [-1 + \delta_0, 1]$  pourvu que  $\delta_0$  soit assez petit.

Afin d'étudier le spectre près de 1, on a besoin de compacité (lorsque  $h$  tend vers 0) sur la famille  $(e_{k,h})_{h \in ]0,1]}$  des fonctions propres associées à la  $k$ -ème valeur propre. On plonge l'ouvert  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$  dans un tore  $\Pi$  de dimension  $Nd$  et on introduit les fonctionnelles

$$\mathcal{E}_{h,M}(u) = \langle (1 - \widetilde{M}_h^M)u, u \rangle_{L^2(\mathcal{O}_{N,\epsilon})}$$

et

$$\mathcal{E}_h^\Pi(v) = \langle (1 - \widetilde{M}_h^M)v, v \rangle_{L^2(\Pi)}.$$

Comme dans la section précédente, on définit une application d'extension  $E : L^2(\mathcal{O}_{N,\epsilon}) \rightarrow L^2(\Pi)$  et l'on montre qu'il existe  $C_0, h_0 > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et  $u \in L^2(\mathcal{O}_{N,\epsilon})$ , on ait :

$$\mathcal{E}_h^\Pi(E(u)) \leq C_0 (\mathcal{E}_{h,M}(u) + h^2 \|u\|_{L^2}^2). \quad (4.2.83)$$

De cette estimation on déduit aisément le lemme suivant :

**Lemme 4.2.14** *Pour tout  $0 \leq \lambda \leq \delta_0/h^2$ , le nombre de valeurs propres de  $\widetilde{M}_h$  dans  $[1 - h^2\lambda, 1]$  (comptées avec multiplicité) est borné par  $C_1(1 + \lambda)^{Nd/2}$ . De plus, toute fonction propre  $\widetilde{M}_h(u) = \lambda u$  avec  $\lambda \in ]1 - \delta_0, 1]$  vérifie l'estimation suivante :*

$$\|u\|_{L^\infty} \leq C_2 h^{-Nd/2} \|u\|_{L^2}. \quad (4.2.84)$$

A l'aide de ce lemme, on peut mettre en oeuvre la stratégie de la section précédente (décomposition spectrale, estimation de Nash) et l'on prouve l'estimation (4.2.75).

Il reste donc à montrer (4.2.73). En utilisant la formule de Taylor ainsi que la forme particulière du bord de  $\mathcal{O}_{N,\epsilon}$ , on montre que pour toute fonction  $\theta \in C^\infty(\overline{\mathcal{O}_{N,\epsilon}})$  vérifiant  $\text{supp}(\theta) \cap \Gamma_{\text{sing}} = \emptyset$  et  $\partial_n \theta|_{\Gamma_{\text{reg}}} = 0$ , on a

$$(1 - \widetilde{M}_h)\theta = h^2|\Delta|_N\theta + r, \quad \|r\|_{L^2} = O(h^{5/2}). \quad (4.2.85)$$

En combinant ce résultat et le Lemme 4.2.14 et en travaillant comme dans la preuve de (4.2.55), on prouve facilement (4.2.73).

## Chapitre 5

# Opérateurs de marche aléatoire sur un domaine non borné

On étudie dans ce chapitre des opérateurs de marche aléatoire sur des espaces d'état non bornés naturels. La différence essentielle avec les travaux précédents réside dans un défaut de compacité de l'injection de  $H^1$  dans  $L^2$ , ainsi que dans la présence de spectre essentiel proche du haut du spectre. Les résultats présentés ont été obtenus avec H. Christianson et C. Guillarmou [CGM10], [GM10].

### 5.1 Cas d'un espace plat

L'exemple le plus simple d'espace d'état non borné sur lequel on peut définir un opérateur de marche aléatoire est donné par l'espace Euclidien  $\mathbb{R}^d$  muni d'une densité de probabilité  $d\pi(x) = \rho(x)dx$ , où  $dx$  désigne la mesure de Lebesgue. On suppose en outre que la fonction  $\rho$  est bornée et ne s'annule pas. L'opérateur de marche aléatoire est donc défini par

$$T_h f(x) = \frac{1}{v_h(x)} \int_{|x-y|<h} f(y)\rho(y)dy \quad (5.1.1)$$

où  $v_h(x) = \int_{|x-y|<h} \rho(y)dy$ . D'après les considérations de la section 3.4, cet opérateur est markovien. Il est autoadjoint sur  $L^2(\mathbb{R}^d, d\nu_h)$  où  $d\nu_h = \frac{v_h(x)\rho(x)}{Z_h}dx$ , la constante  $Z_h$  étant choisie de sorte que  $d\nu_h$  soit une mesure de probabilité. Dans [GM10], nous avons étudié le spectre de  $T_h$  ainsi que la convergence de  $T_h^n$  vers  $d\nu_h$  quand  $n$  tend vers l'infini.

#### 5.1.1 Énoncé des résultats

Le comportement de  $\rho$  à l'infini a une influence fondamentale sur la nature du spectre de  $T_h$ . Nous avons étudié deux types de densité.

**Définition 5.1.1** *On dira que  $\rho$  est tempérée si  $\rho \in C^1(\mathbb{R}^d)$  et s'il existe une constante  $C > 0$  telle que pour tout  $x \in \mathbb{R}^d$*

$$|\nabla\rho(x)| \leq C\rho(x) \quad (5.1.2)$$

*On dira que  $\rho$  est régulière tempérée de type exponentiel (RTE) si  $\rho \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$  et s'il existe des constantes  $R, \kappa_0 > 0$  et  $C_\alpha > 0$ ,  $\alpha \in \mathbb{N}^d$  telles que*

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^d, \forall x \in \mathbb{R}^d, |\partial_x^\alpha \rho(x)| \leq C_\alpha |\rho(x)| \quad (5.1.3)$$

et

$$\forall |x| \geq R, \Delta\rho(x) \geq \kappa_0\rho(x). \quad (5.1.4)$$

Il est assez facile de construire des densités RTE : supposons en effet que  $\rho$  est régulière et qu'il existe des constantes  $a, b > 0$  telles que  $\rho(x) = ae^{-b|x|}$  pour  $|x|$  grand. Alors les hypothèses ci-dessus sont satisfaites avec  $\kappa_0 = a^2$ . Pour des densités vérifiant (5.1.3) et (5.1.4), on définit

$$\kappa = \lim_{R \rightarrow +\infty} \inf_{|x| \geq R} \frac{\Delta\rho(x)}{\rho(x)} \quad (5.1.5)$$

Le second type de densité que nous considérons est le suivant :

**Définition 5.1.2** *On dira que  $\rho$  est gaussienne s'il existe une constante  $\alpha > 0$  telles que  $\rho(x) = (\frac{\alpha}{\pi})^{\frac{d}{2}} e^{-\alpha x^2}$ .*

Il est facile de voir que si  $\rho$  satisfait (5.1.2) ou est de type gaussien, il existe  $C > 0$  et  $h_0 > 0$  tels que

$$\forall x \in \mathbb{R}^d, \forall h \in ]0, h_0], v_h(x) \geq Ch^d \rho(x). \quad (5.1.6)$$

Définissons la fonction

$$a_h(x) := (\alpha_d h^d \rho(x) / v_h(x))^{1/2} \quad (5.1.7)$$

et

$$A_h := \lim_{R \rightarrow \infty} \sup_{|x| \geq R} a_h^2(x). \quad (5.1.8)$$

Nous verrons plus loin que si  $\rho$  est RTE, alors  $A_h = 1 - \frac{\kappa}{2(d+2)} h^2 + O(h^4)$  avec  $\kappa$  défini en (5.1.5).

Dans chacun des cas (tempéré ou gaussien), on arrive à décrire partiellement le spectre de  $T_h$ . Commençons par le cas des densités tempérées. On rappelle que l'opérateur limite  $L_\rho$  est donné par

$$L_\rho = -\Delta + V(x) \quad (5.1.9)$$

où  $V(x) = \frac{\Delta\rho(x)}{\rho(x)}$ . On note  $\kappa = \liminf_{|x| \rightarrow +\infty} V(x) > 0$  d'après (5.1.4). En utilisant (5.1.3), on voit facilement que cet opérateur est autoadjoint sur  $L^2(\mathbb{R}^d)$  avec domaine  $D(L_\rho) = H^2(\mathbb{R}^d)$ . On remarque que le spectre essentiel de  $L_\rho$  est  $[\kappa, +\infty[$ . De plus, on a la factorisation usuelle suivante :

$$L_\rho = \sum_{j=1}^d \ell_j^* \ell_j \quad (5.1.10)$$

avec  $\ell_j = -\partial_{x_j} + \frac{\partial_{x_j} \rho}{\rho}$ . Ceci montre que  $L_\rho$  est positif sur  $L^2(\mathbb{R}^d)$ . De plus,  $\ell_j u = 0$  si et seulement si  $u$  est proportionnel à  $\rho$ . Par conséquent, 0 est une valeur propre simple associée à la fonction propre  $\rho \in L^1 \cap L^\infty \subset L^2$ .

**Théorème 5.1.3** *Les assertions suivantes sont vérifiées :*

- i) *Supposons que  $\rho$  est tempérée au sens de (5.1.2), alors le spectre essentiel de  $T_h$  est contenu dans l'intervalle  $[A_h \gamma_0, A_h]$  où  $A_h$  est défini en (5.1.8) et  $\gamma_0$  au Lemme 3.4.1. Si en outre  $A_h = \lim_{|x| \rightarrow \infty} a_h^2(x)$ , alors  $\sigma_{ess}(T_h) = [A_h \gamma_0, A_h]$ .*
- ii) *Si  $\rho$  est RTE, alors  $A_h = 1 - \frac{\kappa}{2(d+2)} h^2 + O(h^4)$ . Pour  $\alpha \in ]0, 1[$ , supposons que les  $k+1$  premières valeurs propres de  $L_\rho$  sont dans  $[0, \alpha\kappa]$ . Alors, il existe  $C > 0, h_0 > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et pour tout  $j = 1, \dots, k$ ,*

$$\left| 1 - \frac{1}{2(d+2)} \lambda_k h^2 - \mu_k(h) \right| \leq Ch^4.$$



Si  $\rho$  est seulement tempérée, la partie i) du théorème montre que le spectre essentiel de  $T_h$  peut être exactement l'intervalle  $[M, 1]$ . Prenons par exemple une densité  $\rho$  égale à  $|x|^{-m}$  pour  $|x|$  grand, avec  $m > d$ . On peut montrer facilement que  $v_h(x)/\rho(x)$  tend vers 1 lorsque  $|x|$  tend vers l'infini et par suite  $A_h = 1$ .

Remarquons aussi qu'il existe des densités  $\rho$  telles que le spectre discret de  $L_\rho$  sous son spectre essentiel est non vide. Supposons par exemple que  $\rho(x) = e^{-\tau\alpha(x)}$  avec  $\tau > 0$  et  $\alpha(x)$  régulière égale à  $|x|$  pour  $|x| > 1$  et vérifiant  $\nabla\alpha(0) = 0$ . Alors

$$P_\tau := \tau^{-2}L_\rho = \tau^{-2}\Delta + |\nabla\alpha|^2 + \tau^{-1}\Delta\alpha$$

est un  $\tau^{-1}$  opérateur semiclassique. Son symbole principal semiclassique est  $p(x, \xi) = |\xi|^2 + |\nabla\alpha|^2$ . Par ailleurs, pour  $|x| > 1$ , on a  $|\nabla\alpha| = 1$  et  $\Delta\alpha = 0$  et par conséquent le spectre essentiel de  $P_\tau$  est  $[1, \infty)$ . D'autre part, puisque  $\nabla\alpha(0) = 0$  on a  $\text{Vol}\{(x, \xi) \in \mathbb{R}^{2d}; p(x, \xi) \in [0, \frac{1}{2}]\} > 0$  et on peut appliquer le théorème 9.6 de [DS99] pour conclure qu'il existe au moins  $C\tau^d$  valeurs propres de  $P_\tau$  dans  $[0, \frac{1}{2}]$  pour une certaine constante  $C > 0$ .

Dans le cas où la densité  $\rho$  est gaussienne, l'opérateur limite prend la forme d'un oscillateur harmonique  $L_\rho = -\Delta + 4\alpha^2|x|^2 - 2d\alpha$  dont le spectre est discret  $\sigma(L_\rho) = 4\alpha\mathbb{N}$ . De plus les fonctions propres associées à la valeur propre  $4\alpha k$  sont de la forme  $H_k(x)e^{-2\alpha|x|^2}$  pour un certain polynôme  $H_k$ . On renvoie à [Hel88] pour plus de détails.

**Théorème 5.1.4** *Supposons que  $\rho$  est gaussienne, alors l'opérateur  $T_h$  est compact et pour tout  $K \geq 0$ , il existe  $C > 0$  et  $h_0 > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et pour tout  $k = 1, \dots, K$ ,*

$$\left| 1 - \frac{1}{2(d+2)}\lambda_k h^2 - \mu_k(h) \right| \leq Ch^4. \quad (5.1.11)$$

*De plus, il existe  $\delta_0 > 0$  tel que pour tout  $\lambda \in [0, \delta_0]$ , le nombre  $N(\lambda, h)$  de valeurs propres de  $T_h$  dans  $[1 - \lambda, 1]$  satisfait*

$$N(\lambda, h) \leq C(1 + \lambda h^{-2})^d. \quad (5.1.12)$$

On remarque ici la puissance  $d$  dans la l'estimation de Weyl (5.1.12), qui est à comparer avec la puissance  $\frac{d}{2}$  dans le cas d'une variété compacte (c.f. (4.1.4)). Ceci n'est pas surprenant, puisque le même phénomène se produit pour des opérateurs différentiels elliptiques (sur une variété compacte et sur  $\mathbb{R}^d$ ).

A partir de ces résultats, on peut aborder le problème de la convergence des itérées de  $T_h$  vers la mesure stationnaire  $d\nu_h$  en variation totale. Ici, la situation est légèrement différente du cas d'un espace d'états compacts. En effet, on a le théorème suivant (on rappelle que la norme de variation totale est définie en (3.3.6)) :

**Théorème 5.1.5** *Il existe  $C > 0$  tel que pour tout  $n \in \mathbb{N}$ ,  $h \in ]0, 1]$ ,  $\tau > 0$  et  $|x| \geq \tau + (n+1)h$ , on a*

$$\|T_h^n(x, dy) - d\nu_h\|_{TV} \geq 1 - Cp(\tau) \quad (5.1.13)$$

*avec  $p(\tau) = e^{-2\alpha\tau(\tau-h)}$  si  $\rho = \beta e^{-\alpha|x|^2}$  est gaussienne et  $p(\tau) = \int_{|y| \geq \tau} \rho(y)^2 dy$  si  $\rho$  est RTE.*

Ce résultat montre que contrairement aux cas compacts précédemment rencontré, la convergence en variation totale ne peut pas être uniforme par rapport au point de départ  $x$ . De manière intuitive cela semble assez évident : si la variété n'est pas bornée,  $x$  peut être arbitrairement loin et le temps pris par la marche aléatoire pour explorer la variété arbitrairement long. Ce phénomène est indécélable si l'on mesure la convergence avec la norme  $L^2$ , les bouts à l'infini étant de mesure très petite. L'estimée optimale en variation totale est la suivante :

**Théorème 5.1.6** *Il existe  $C > 0$  et  $h_0 > 0$  tels que pour tout  $n \in \mathbb{N}$ ,  $h \in ]0, h_0]$  et  $\tau > 0$ ,*

$$\sup_{|x| < \tau} \|T_h^n(x, dy) - d\nu_h\|_{TV} \leq Cq(\tau, h)e^{-ng(h)} \quad (5.1.14)$$

avec  $q(\tau, h) = e^{\alpha\tau(\tau+3h)}$  si  $\rho(x) = \beta e^{-\alpha|x|^2}$  est gaussienne et  $q(\tau, h) = h^{-\frac{d}{2}} \sup_{|x| < \tau} \frac{1}{\rho(x)}$  si  $\rho$  est RTE.

Ce résultat doit être comparé au Théorème 4.1.4. Ici, la mesure stationnaire échantillonnée n'est pas  $d\pi$  mais la mesure  $d\nu_h$ . Afin d'échantillonner  $d\pi$ , il faudrait "metropoliser"  $T_h$  à la manière de ce qui nous avons fait sur une variété compacte.

### 5.1.2 Esquisses de preuves

La stratégie générale de démonstration des résultats précédents est la même que dans [LM10]. La principale difficulté est due au manque de compacité sur la famille de fonctions propres  $(e_k^h)_{h \in ]0, 1]}$  de l'opérateur  $T_h$ . Contrairement au cas d'une variété compacte, l'inclusion de  $H^s$ ,  $s > 0$ , dans  $L^2$  n'est pas compacte. Il nous faudra prouver en plus de la décroissance sur les fonctions propres de  $T_h$ . La démonstration de ces propriétés de décroissance est l'une des nouveautés de [GM10].

#### Structure de l'opérateur

On commence notre étude en conjuguant  $T_h$  de manière à se ramener à un opérateur agissant sur  $L^2(\mathbb{R}^d, dx)$ . D'après la définition de  $d\nu_h$ , on voit facilement qu'il existe des constantes  $c_1, c_2 > 0$  telles que  $c_1 h^d \leq Z_h \leq c_2 h^d$ . On définit l'opérateur unitaire  $\Omega : L^2(\mathbb{R}^d, dx) \rightarrow L^2(\mathbb{R}^d, d\nu_h)$  par

$$\Omega f(x) = \sqrt{\frac{Z_h}{v_h(x)\rho(x)}} f(x). \quad (5.1.15)$$

et l'on pose  $\tilde{T}_h = \Omega^* T_h \Omega$  de sorte que

$$\tilde{T}_h f(x) = a_h(x) \bar{T}_h(a_h f)$$

où la fonction  $a_h$  est définie par (5.1.7) et (avec  $\alpha_d = \text{Vol}(B_{\mathbb{R}^d}(0, 1))$ )

$$\bar{T}_h g(x) := \frac{1}{\alpha_d h^d} \int_{|x-y| < h} f(y) dy = G_d(hD_x). \quad (5.1.16)$$

Le lemme suivant rassemble les principales propriétés de la fonction  $a_h$  nécessaires à notre analyse.

**Lemme 5.1.7** *La fonction  $a_h$  est régulière et vérifie les assertions suivantes :*

– si  $\rho$  est de type RTE, alors

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^d, \exists C_\alpha > 0, \forall h \in ]0, 1], |\partial_x^\alpha a_h(x)| \leq C_\alpha h^2 \quad (5.1.17)$$

et il existe  $C > 0$  tel que

$$\forall x \in \mathbb{R}^d, \left| \frac{1}{a_h^2(x)} - 1 - \frac{h^2}{2(d+2)} \frac{\Delta \rho}{\rho} \right| \leq Ch^4. \quad (5.1.18)$$

En particulier, on a  $A_h = 1 - \frac{\kappa}{2(d+2)} h^2 + O(h^4)$ .

– si  $\rho$  est gaussienne, alors

$$\forall \alpha \in \mathbb{N}^d, \exists C_\alpha > 0, \forall h \in ]0, 1], |\partial_x^\alpha a_h(x)| \leq C_\alpha h^{|\alpha|}. \quad (5.1.19)$$

et

$$\forall M > 0, \exists C_M > 0, \forall |x| < Mh^{-1}, \left| \frac{1}{a_h^2(x)} - 1 - \frac{(4\alpha^2|x|^2 - 2d\alpha)}{2(d+2)} h^2 \right| \leq C_M |x|^4 h^4, \quad (5.1.20)$$

$$\exists C, R > 0, \forall |x| \geq R, \frac{1}{a_h^2(x)} \geq \max(1 + Ch^2|x|^2, Ce^{h|x|}) \quad (5.1.21)$$

On déduit facilement de ce lemme et du fait que  $G_d \in S(\langle \xi \rangle^{-\max(1, \frac{d-1}{2})})$  le corollaire suivant.

**Corollaire 5.1.8** *L'opérateur  $\tilde{T}_h$  est un opérateur pseudodifférentiel de symbole  $p_h(x, \xi) \in S(\mathbb{R}^{2d}, \langle \xi \rangle^{-\max(1, \frac{d-1}{2})})$ . De plus, on a l'approximation suivante :*

$$p_h(x, \xi) = a_h^2(x)G_d(\xi) + h^m r_h(x, \xi) \quad (5.1.22)$$

avec  $r_h \in S(\mathbb{R}^{2d}, \langle \xi \rangle^{-\max(1, \frac{d-1}{2})})$  et  $m = 3$  si  $\rho$  est RTE et  $m = 2$  si  $\rho$  est gaussienne.

Armé du lemme précédent, il est assez facile de décrire le spectre essentiel de  $T_h$ . Dans le cas où  $\rho$  est tempérée, on montre facilement le point i) du Théorème 5.1.3. Dans le cas où  $\rho$  est gaussienne, on déduit facilement de (5.1.21) et du fait que  $G_d \in S(\langle \xi \rangle^{-\max(1, \frac{d-1}{2})})$  que  $T_h$  est compact.

Passons maintenant à l'étude des valeurs propres. Le schéma général de la preuve est le même que dans le cas d'une variété compacte. Le point clef est l'obtention d'estimations a priori des fonctions propres de  $T_h$ .

### Etude du spectre discret dans le cas d'une densité gaussienne

Dans toute cette section, on suppose que  $\rho$  est gaussienne. On commence par établir la régularité des fonctions propres de  $\tilde{T}_h$ . On rappelle que pour tout  $1/2 > \delta > 0$ , il existe  $s_\delta > 0$  tel que  $|G_d(\xi)| \leq 1 - 2\delta$  pour  $|\xi|^2 \geq s_\delta$ .

**Lemme 5.1.9** *Soient  $\delta \in [0, \frac{1}{2}[$  et  $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  telle que  $\chi = 1$  sur  $[-s_\delta, s_\delta]$ . Alors, il existe  $h_0 > 0$  et des constantes positives  $(A_s)_{s \in \mathbb{R}}$  et  $(B_{k,s})_{k \in \mathbb{N}, s \in \mathbb{R}}$  telles que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et tout  $\lambda_h \in [1 - \delta, 1]$ ,  $e_h \in L^2(\mathbb{R}^d, dx)$  vérifiant  $\tilde{T}_h e_h = \lambda_h e_h$ ,  $\|e_h\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = 1$ , on a  $e_h \in H^s(\mathbb{R}^d)$  pour tout  $s \in \mathbb{R}$ , et*

$$\|e_h\|_{H^s(\mathbb{R}^d)} \leq A_s \left(1 + \frac{1 - \lambda_h}{h^2}\right)^{\frac{s}{2}}. \quad (5.1.23)$$

De plus, pour tout  $s \in \mathbb{R}$  et  $k \in \mathbb{N}$ , on a

$$\|(1 - \chi)(-h^2 \Delta) e_h\|_{H^s(\mathbb{R}^d)} \leq B_{k,s} h^k. \quad (5.1.24)$$

*Preuve.* De l'inégalité  $\|\tilde{T}_h\|_{L^2 \rightarrow H^1} = O(h^{-1})$  et de l'identité  $e_h = \frac{1}{\lambda_h} \tilde{T}_h e_h$  avec  $\lambda_h \geq 1 - \delta$  on déduit

$$\|e_h\|_{H^s(\mathbb{R}^d)} = O(h^{-s}) \quad (5.1.25)$$

Soit maintenant  $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  telle que  $\chi = 1$  sur  $[-s_\delta, s_\delta]$ , de sorte que

$$(1 - \chi)(|\xi|^2)G_d(\xi) \leq (1 - 2\delta)(1 - \chi)(|\xi|^2).$$

En combinant cette estimation avec le corollaire 5.1.8 et le fait que  $a_h \leq 1 + O(h^2)$ , on obtient

$$(1 - \chi(|\xi|^2))(\lambda_h - p_h(x, \xi)) \geq \frac{\delta}{2}(1 - \chi)(|\xi|^2) \quad (5.1.26)$$

On déduit immédiatement de cette minoration que  $\|(1 - \chi(h^2\Delta))e_h\|_{L^2} = O(h^\infty)$  et en interpolant avec (5.1.25) on obtient

$$\|(1 - \chi(h^2\Delta))e_h\|_{H^s} = O(h^\infty). \quad (5.1.27)$$

Il reste donc à prouver (5.1.34). En utilisant à nouveau la structure de  $G_d$  et en divisant par  $a_h^2$  l'équation  $\tilde{T}_h e_h = \lambda_h e_h$ , on obtient

$$h^2 \Delta F(h^2 \Delta) e_h = (1 - \lambda_h a_h^{-2}(x) + h^2 \text{Op}_h(\tilde{r}_h)) e_h \quad (5.1.28)$$

avec  $\tilde{r}_h \in S(1)$ . En posant  $R^2 = (1 - \lambda_h)/(h^2\epsilon)$  avec  $\epsilon$  petit, on déduit du Lemme 5.1.7 que

$$\begin{aligned} (1 - \lambda_h a_h^{-2}(x)) &= O(h^2 + (1 - \lambda_h)), \quad \forall |x| \leq R \\ (1 - \lambda_h a_h^{-2}(x)) &\leq -C\lambda_h h^2 |x|^2 + (1 - \lambda_h) < 0, \quad \forall |x| \geq R \end{aligned} \quad (5.1.29)$$

Par suite, le membre de droite dans (5.1.28) est contrôlé par  $O(h^2 + (1 - \lambda_h))$ , ce qui permet de montrer (5.1.34) avec  $s = 0$ . On passe au cas  $s$  quelconque en interpolant.  $\square$

Le deuxième ingrédient dans l'analyse du spectre discret de  $T_h$  est l'obtention d'estimations de décroissance des fonctions propres.

**Lemme 5.1.10** *Soit  $\delta > 0$  et  $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  égale à 1 sur  $[-s_\delta, s_\delta]$ , alors il existe  $h_0$  tel que , pour tout  $k, s \in \mathbb{N}$  il existe  $C_{k,s} > 0$  tel que pour tout  $h \leq h_0$  et pour toute fonction propre  $e_h \in L^2(\mathbb{R}^d)$  de  $\tilde{T}_h$  associée à une valeur propre  $\lambda_h \in [1 - h^2\delta, 1]$ , on a*

$$\|\langle x \rangle^k \chi(h^2\Delta) e_h\|_{H^s(\mathbb{R}^d)} \leq C_{k,s} \|\chi(h^2\Delta) e_h\|_{H^{s+k}(\mathbb{R}^d)} \quad (5.1.30)$$

*Preuve.* On déduit de (5.1.28) et (5.1.24) que

$$(1 - \lambda_h a_h^{-2}(x)) \chi(h^2\Delta) e_h = h^2 \text{Op}_h(r_h) \chi(h^2\Delta) \Delta e_h \quad (5.1.31)$$

pour un certain  $r_h \in S(1)$ . Par ailleurs, il existe  $R > 0$  assez grand tel que  $a_h^{-2}(x) \geq 1 + Ch^2|x|^2$  pour  $|x| \geq R$ . Par suite, si  $\lambda_h = 1 - h^2 z_h$  avec  $0 < z_h < \delta$ , on a pour  $|x| > R$

$$-1 + \lambda_h a_h^{-2}(x) \geq h^2(C|x|^2 - z_h) \geq C'h^2(1 + |x|^2) \quad (5.1.32)$$

pour un certain  $C' > 0$  indépendant de  $h$ . On déduit aisément de cette estimation que pour tout  $s \geq 0$ , on a

$$\|\langle x \rangle^2 \chi(h^2\Delta) e_h\|_{H^s(\mathbb{R}^d)} \leq C \|\chi(h^2\Delta) e_h\|_{H^{s+2}(\mathbb{R}^d)}$$

Il suffit alors d'itérer la preuve.  $\square$

Grâce aux Lemmes 5.1.9 et 5.1.10, on voit que si  $(e_h)_{h \in ]0, h_0]}$  est une famille de fonctions propres associées à une valeur propre  $\lambda_h \in [1 - h^2\delta, 1]$  et normalisée dans  $L^2$ , alors  $(e_h)_h$  est compacte dans tout espace de Sobolev. Cela permet d'appliquer la stratégie générale de la section 4.1 et permet de prouver(5.1.11).

Il reste à établir l'estimation de Weyl (5.1.12). Fixons  $\delta > 0$  petit. Pour  $\tau > 0$ , on définit l'opérateur

$$P_\tau = \tau(\chi^2(\sqrt{-\Delta/\tau}) + \chi^2(\sqrt{|x|^2/\tau}))$$

où  $\chi \in C^\infty((0, \infty))$  est une fonction positive croissante vérifiant  $\chi(x) = x$  pour  $x < 1 - \delta$  et  $\chi(x) = 1$  pour  $x > 1$ . Il est clair que  $P_\tau$  est un opérateur borné, auto-adjoint sur  $L^2(\mathbb{R}^d)$  de norme inférieure à  $2\tau$  et l'on peut voir facilement que son spectre essentiel est contenu dans l'intervalle  $[\tau, 2\tau]$ . On considère alors le projecteur de rang fini  $\Pi_{\tau/2} = \mathbb{1}_{[0, \tau/2]}(P_\tau)$ . On montre assez facilement que  $\text{rang}(\Pi_\tau) \leq C \text{rang}(f(\tau^{-1}(-\Delta + |x|^2))) = O(\tau^d)$ , pour une certaine fonction  $f \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ . Il reste donc à montrer qu'il existe  $\epsilon > 0$ ,  $C > 0$  indépendants de  $\tau, h$  tels que pour tout  $f$  appartenant à l'image de  $1 - \Pi_{\tau/2}$ , on ait :  $\tau \leq \epsilon h^{-2}$

$$\langle T_h f, f \rangle \leq (1 - C\tau h^2) \|f\|_{L^2}^2. \quad (5.1.33)$$

Ceci découle assez facilement du fait qu'il existe  $\epsilon > 0$  et  $C > 0$  indépendants de  $\tau, h$  tels que les deux estimations suivantes soient vraies pour tout  $\tau \leq \epsilon h^{-2}$  :

$$a_h^2(x) \leq 1 - Ch^2 \tau \chi(\sqrt{|x|^2/\tau})^2$$

et

$$G_d^2(h\xi) \leq 1 - Ch^2 \tau \chi(\sqrt{|\xi|^2/\tau})^2.$$

### Etude du spectre discret dans le cas d'une densité tempérée

On décrit maintenant les principales étapes de la preuve du Théorème 5.1.3. On suppose dans toute cette section que  $\rho$  est de type RTE. Le schéma général est le même que dans la cas gaussien. Le point clef de la preuve est l'obtention d'estimations a priori des fonctions propres. En travaillant comme dans le cas gaussien, on montre les lemmes suivants :

**Lemme 5.1.11** *Soit  $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  égale à 1 près de 0. Pour tout  $C > 0$ , il existe  $h_0 > 0$  et des constantes positives  $(A_s)_{s \in \mathbb{R}}$ ,  $(B_{k,s})_{k \in \mathbb{N}, s \in \mathbb{R}}$  telles que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et pour tout  $\lambda_h \in [1 - Ch^2, 1]$ ,  $e_h \in L^2(\mathbb{R}^d, dx)$  vérifiant  $\tilde{T}_h e_h = \lambda_h e_h$ ,  $\|e_h\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = 1$ , on a  $e_h \in H^s(\mathbb{R}^d)$  pour tout  $s \in \mathbb{R}$  et*

$$\|e_h\|_{H^s(\mathbb{R}^d)} \leq A_s \left(1 + \frac{1 - \lambda_h}{h^2}\right)^{\frac{s}{2}}. \quad (5.1.34)$$

De plus, pour tout  $k \in \mathbb{N}$ ,  $s \in \mathbb{R}$ , on a

$$\|(1 - \chi)(-h^2 \Delta) e_h\|_{H^s(\mathbb{R}^d)} \leq B_{k,s} h^k. \quad (5.1.35)$$

**Lemme 5.1.12** *Soient  $\alpha \in ]0, 1[$  et  $\kappa$  défini en (5.1.5). Soient  $\phi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$  et  $\chi \in C^\infty(\mathbb{R})$  telle que  $\chi(x) = 1$  si  $|x| \geq 2$  et  $\chi(x) = 0$  si  $|x| \leq 1$ . Alors, il existe  $C > 0$ ,  $R > 0$  et  $h_0 > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et pour tout  $\lambda_h \in [1 - \alpha h^2 \frac{\kappa}{2(d+2)}, 1]$ ,  $e_h \in L^2(\mathbb{R}^d, dx)$  vérifiant  $\tilde{T}_h e_h = \lambda_h e_h$  et  $\|e_h\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = 1$ , on a*

$$\|\chi(x/R) \phi(h^2 \Delta) e_h\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = O(h^2)$$

En particulier, pour tout  $s \in \mathbb{R}$ ,  $\chi(x/R) e_h$  tend vers 0 dans  $H^s(\mathbb{R}^d)$  lorsque  $h$  tend vers 0.

Ces lemmes fournissent suffisamment de compacité pour mener à bien la même stratégie que dans le cas gaussien. On renvoie à [GM10] pour les détails.

## Estimations de variation totale

On donne ici les éléments de démonstration des estimations de convergence vers l'équilibre en variation totale. On commence par la preuve du Théorème 5.1.5. On note  $\Pi_{0,h}$  l'opérateur de projection sur les fonctions constantes dans  $L^2(\mathbb{R}^d, d\nu_h)$  :

$$\Pi_{0,h}f = \int_{\mathbb{R}^d} f(y) d\nu_h(y). \quad (5.1.36)$$

Il s'agit de montrer que pour tout  $\tau > 0$  et pour tout  $x \in \mathbb{R}^d$  tel que  $|x| \geq \tau + (n+1)h$ ,

$$\frac{1}{2} \sup_{\|f\|_{L^\infty}=1} |T_h^n(f)(x) - \Pi_{0,h}(f)| \geq 1 - Cp(\tau),$$

où  $p(\tau) = e^{-2\alpha\tau(\tau-h)}$  si  $\rho = \beta e^{-\alpha|x|^2}$  et  $p(\tau) = \int_{|y| \geq \tau} \rho(y)^2 dy$  si  $\rho$  est RTE.

On va en fait montrer un résultat légèrement plus fort, à savoir que pour tout  $\tau > 0$  il existe une fonction  $f_\tau \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$  telle que  $\|f_\tau\|_{L^\infty} = 1$  et pour tout  $x \in \mathbb{R}^d$  tel que  $|x| \geq \tau + (n+1)h$ ,  $\frac{1}{2}|T_h^n(f_\tau)(x) - \Pi_{0,h}(f_\tau)| \geq 1 - Cp(\tau)$ . Considérons la fonction  $f_\tau$  définie par

$$\begin{aligned} f_\tau(x) &= \mathbb{1}_{[\tau, +\infty[}(|x|) - \mathbb{1}_{[0, \tau[}(|x|) \\ &= -1 + 2 \mathbb{1}_{[\tau, +\infty[}(|x|). \end{aligned} \quad (5.1.37)$$

Pour  $|x| \geq \tau + (n+1)h$ , on déduit de la propagation à vitesse au plus  $h$  que

$$T_h^n f_\tau(x) = 1. \quad (5.1.38)$$

Par ailleurs, un calcul simple montre que

$$\Pi_{0,h}f_\tau = -1 + \frac{2}{Z_h} \int_{|y| \geq \tau} v_h(y) \rho(y) dy \leq -1 + Cp(\tau). \quad (5.1.39)$$

En combinant les équations (5.1.38) et (5.1.39), on obtient le résultat annoncé.

Passons maintenant à la preuve du Théorème 5.1.6. On remarque que

$$\sup_{|x| \leq \tau} \|T_h^n(x, dy) - d\nu_h\|_{TV} = \frac{1}{2} \|T_h^n - \Pi_{0,h}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d) \rightarrow L^\infty(|x| \leq \tau)}. \quad (5.1.40)$$

Par ailleurs, on déduit du théorème spectral que

$$\|T_h^n - \Pi_{0,h}\|_{L^2(d\nu_h) \rightarrow L^2(d\nu_h)} \leq Ce^{-ng(h)}. \quad (5.1.41)$$

Comme  $T_h$  est borné par 1 de  $L^\infty$  dans  $L^2$ , il s'agit d'estimer  $\|T_h\|_{L^2(d\nu_h) \rightarrow L^\infty(B_\tau)}$ . Or pour tout  $f \in L^2(d\nu_h)$ , on a

$$|T_h f(x)| \leq \frac{Z_h^{\frac{1}{2}}}{m_h(x)} \left( \int_{|x-y| < h} \frac{\rho(y)}{v_h(y)} dy \right)^{\frac{1}{2}} \|f\|_{L^2(d\nu_h)} \quad (5.1.42)$$

Un calcul simple montre alors que  $\|T_h\|_{L^2(d\nu_h) \rightarrow L^\infty(B_\tau)} \leq C/(h^{\frac{d}{2}}\rho(x))$  dans le cas où  $\rho$  est RTE et  $\|T_h\|_{L^2(d\nu_h) \rightarrow L^\infty(B_\tau)} \leq Ch^{-\frac{d}{2}}e^{\alpha\tau(\tau+3h)}$  dans le cas où  $\rho$  est gaussienne. Ceci permet de conclure immédiatement dans le cas RTE. Dans le cas gaussien, il faut travailler à la manière de [LM10] en utilisant en particulier l'estimation de Weyl.

## 5.2 Cas d'une variété présentant des pointes hyperboliques

On étudie dans cette section l'opérateur de marche aléatoire semiclassique dans un cas simple de variété non compacte de volume fini. Ces résultats ont été obtenus en collaboration avec H. Christianson et C. Guillarmou [CGM10].

On suppose que  $(M, g)$  est une variété Riemannienne de dimension 2, de volume fini et présentant un nombre fini de "bouts"  $E_0, \dots, E_n$ . On suppose en outre que chacun de ces bouts  $E_i$  est isométrique à une pointe hyperbolique

$$(t_i, \infty)_t \times (\mathbb{R}/\ell\mathbb{Z})_z \text{ muni de la métrique } g = dt^2 + e^{-2t} dz^2.$$

pour un certain  $t_i > 0$ . Chaque bout peut aussi être vu comme le quotient  $\langle \gamma \rangle \backslash \mathbb{H}^2$  de  $\mathbb{H}^2$  par le groupe abélien engendré par une translation  $\gamma : (x, y) \in \mathbb{H}^2 \rightarrow (x, y + \ell) \in \mathbb{H}^2$  où le plan hyperbolique est représenté par  $\mathbb{H}^2 = \{(x, y) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}\}$ . On considère l'opérateur de marche aléatoire défini par (3.4.1) dans le cas où  $\Omega = M$  et la densité  $\bar{\theta}$  est constante. Pour toute fonction continue  $f$  sur  $M$  et pour tout  $m \in M$ , on a donc

$$T_h f(m) = \frac{1}{|B_h(m)|} \int_{B_h(m)} f(m') d_g m' \quad (5.2.1)$$

La mesure  $d\nu_h$  prend la forme  $d\nu_h(m) = \frac{|B_h(m)|}{Z_h} d\nu_g(m)$ , pour une certaine constante de renormalisation  $Z_h$ . L'opérateur  $T_h$  est bien évidemment markovien et autoadjoint sur  $L^2(M, d\nu_h)$ . Notre principal résultat est le suivant :

**Théorème 5.2.1** *Il existe  $h_0 > 0$  et  $\delta > 0$  tels que :*

i) *Pour tout  $h \in ]0, h_0]$ , le spectre essentiel de  $T_h$  agissant sur  $L^2(M, d\nu_h)$  est donné par l'intervalle*

$$I_h = \left[ \frac{h}{\sinh(h)} A, \frac{h}{\sinh(h)} \right]$$

où  $A = \min_{x>0} \frac{\sin(x)}{x} > -1$ .

ii) *Pour tout  $h \in ]0, h_0]$ ,  $\text{Spec}(K_h) \cap [-1, -1 + \delta] = \emptyset$ .*

iii) *Il existe  $c > 0$  tel que pour tout  $h \in ]0, h_0]$ , 1 est valeur propre simple de  $T_h$  et le trou spectral  $g(h) := \text{dist}(\text{Spec}(T_h) \setminus \{1\}, 1)$  vérifie*

$$ch^2 \leq g(h) \leq \min \left( \frac{(\lambda_1 + \alpha(h))h^2}{8}, 1 - \frac{h}{\sinh(h)} \right) \quad (5.2.2)$$

où  $\lambda_1$  est la plus petite valeur propre non nulle de  $-\Delta_g$  sur  $L^2(M)$  et  $\alpha(h)$  une fonction tendant vers 0 lorsque  $h \rightarrow 0$ .

En comparaison du Théorème 4.1.1 dans le cas compact, ce résultat est plus faible. En effet, on ne précise pas la localisation du spectre de  $T_h$  en terme de valeurs propres du Laplacien. Ceci est dû au fait que dans une certaine région des pointes hyperboliques, la géométrie des boules change radicalement, de sorte que l'approximation de  $T_h$  par une fonction du Laplacien n'est plus valable dans cette région de la surface. On est donc amené à utiliser une approche variationnelle qui est moins précise. On note toutefois que l'argument utilisé n'est pas une simple transposition de la méthode du chemin de la section 4.2, la variété étant non bornée.

Une autre différence fondamentale est l'existence de spectre essentiel près de 1. Dans le cas d'une variété compacte ou d'un ouvert borné, nous avons vu que le spectre essentiel se trouvait

à distance  $\delta > 0$  de 1 avec  $\delta$  indépendant de  $h$ . Cette information était cruciale dans l'obtention d'estimations de convergence vers l'équilibre en distance de variation totale. En effet, le terme en  $(1 - \delta)^n$  provenant de l'estimation  $L^2 \rightarrow L^2$  permettait d'absorber facilement la perte en  $h^{-c}$  de l'injection  $L^2 \rightarrow L^\infty$ . Ici, même si le trou spectral est encore en  $h^2$ , il y a du spectre essentiel à distance  $h^2$  et l'estimation  $L^2$  ne permet pas de rattraper les pertes en  $h^{-c}$ .

Le second résultat que nous démontrons est une estimation grossière de la vitesse de convergence vers l'équilibre en norme de variation totale. Comme dans le cas de l'espace euclidien muni d'une densité de probabilité, on montre une estimation qui dépend du point de départ et l'on prouve qu'il ne peut pas y avoir d'estimation uniforme. Supposons pour simplifier qu'il n'y a qu'un seul bout hyperbolique  $E_0$ . La surface  $M$  s'écrit  $M = M_0 \cup E_0$  avec  $M_0$  compacte et  $E_0$  isométrique à la pointe  $(t, y) \in ]t_0, \infty[ \times (\mathbb{R}/\ell\mathbb{Z})$  muni de la métrique  $g = dt^2 + e^{-2t} dz^2$ . On étend la fonction  $m \in E_0 \mapsto t(m)$  en une fonction continue sur  $M$  telle que  $0 < t(m) < t_0$  pour tout  $m \in M_0$ . Pour  $\tau \geq t_0$ , on note  $M_{<\tau} = \{m \in M, t(m) < \tau\}$ .

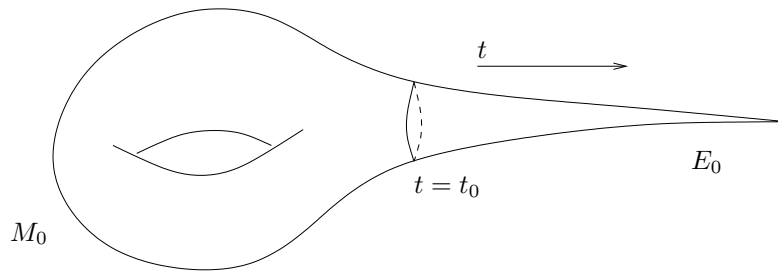


FIGURE 5.2.1 – La décomposition  $M = M_0 \cup E_0$ .

**Théorème 5.2.2** *Il existe  $h_0 > 0$  tel que :*

*i) Il existe  $C > 0$  tel que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et pour tout  $n \in \mathbb{N}$ ,*

$$\sup_{m \in M_{<\tau}} \|K_h^n(m, dm') - d\nu_h\|_{TV} \leq C \max(h^{-1}, h^{-\frac{1}{2}} e^{\frac{\tau}{2}}) e^{-ng(h)} \quad (5.2.3)$$

*ii) Il existe  $C > 0$  tel que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et pour tout  $n \in \mathbb{N}$ , il existe  $m \in M_{<2nh}$  tel que*

$$\|K_h^n(m, dm') - d\nu_h\|_{TV} \geq 1 - Ch^{-1} e^{-2nh} \quad (5.2.4)$$

Nous allons maintenant donner les idées de preuve de ces résultats. La preuve du Théorème 5.2.2 est très proche de celle des Théorèmes 5.1.6 et 5.1.6. Nous renvoyons à [CGM10] pour les détails. Pour ce qui concerne le Théorème 5.2.1, le plan de la preuve est le suivant. Dans un premier temps, on utilise la forme spécifique du bout hyperbolique pour donner une expression agréable de l'opérateur  $T_h$ . On utilise ensuite cette expression pour étudier le spectre essentiel de  $T_h$ . On s'attaque alors à l'étude du trou spectral par une méthode variationnelle. Formellement, l'opérateur agissant sur des fonctions supportées dans la partie compacte  $M_0$  a clairement un trou spectral (d'après l'étude du cas compact). Si on le calcule dans une pointe, c'est un opérateur pseudodifférentiel dont le symbole est majoré par  $1 - Ch^2$  pour un certain  $C > 0$ . La difficulté consiste à recoller les morceaux par une méthode variationnelle. Enfin, la preuve de la borne supérieure sur le trou spectral se fait en approchant l'opérateur  $T_h$  par un opérateur différentiel et en utilisant cette approximation pour construire un quasimode pour  $T_h$ .

Afin de simplifier l'exposé, nous supposons comme ci dessus qu'il n'y a qu'un seul bout hyperbolique  $E_0$ .



## 5.2.1 Etude de l'opérateur dans une pointe hyperbolique

### Description des boules géodésiques dans une pointe

On commence par rappeler brièvement la forme des boules géodésiques dans l'espace hyperbolique  $\mathbb{H}^2 = \{(x, y) \in \mathbb{R}_+ \times \mathbb{R}\}$  muni de la même métrique  $(dx^2 + dy^2)/x^2$ . On utilise les coordonnées  $x = e^t$ , pour lesquelles l'élément de volume devient

$$dv_g = e^{-t} dt dy.$$

Dans ce système de coordonnées, une boule  $B((e^t, y), r)$  centrée en  $(e^t, y)$  et de rayon  $r$  est exactement la boule Euclidienne centrée en  $(e^t \cosh r, y)$  et de rayon Euclidien  $e^t \sinh r$  (voir figure 5.2.2). En passant en coordonnées polaires, on voit facilement que le volume d'une telle boule est

$$|B_{\mathbb{H}^2}((e^t, y), r)| = 2\pi \int_0^r \sinh(r') dr' = 2\pi(\cosh(r) - 1).$$

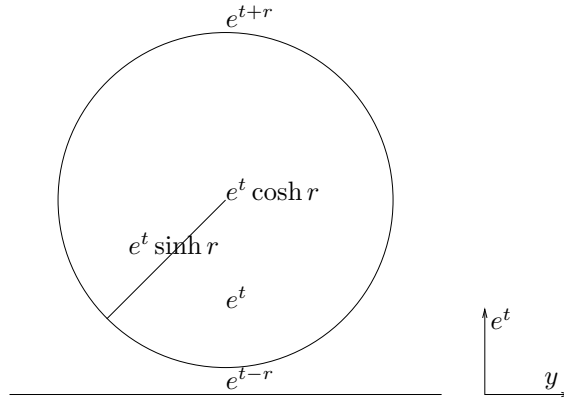


FIGURE 5.2.2 – La boule hyperbolique en coordonnées euclidiennes. Le centre en coordonnées hyperboliques est à hauteur  $e^t$ , et en coordonnées euclidiennes à  $e^t \cosh r$ .

Passons maintenant au cas d'une pointe hyperbolique. Une telle pointe  $E_0$  est identifiée avec la région  $x > x_0$  du quotient de l'espace hyperbolique  $\langle \gamma \rangle \backslash \mathbb{H}^2$ , où  $\gamma(x, y) = (x, y + \ell)$  et  $x_0 > 0$  est un nombre fixé. Un domaine fondamental du groupe cyclique  $\langle \gamma \rangle$  dans  $\mathbb{H}^2$  est donné par la bande  $S := \{x > 0, \ell \geq y > 0\}$ . La pointe  $E_0$  peut donc être vue comme le quotient  $\langle \gamma \rangle \backslash (S \cap \{x > x_0\})$ . La boule géodésique  $B_h(m)$  dans  $E_0$  est donnée par

$$B_h(m) = \pi(\{m' \in \mathbb{H}^2; d_{\mathbb{H}^2}(m, m') \leq h\})$$

où  $\pi : \mathbb{H}^2 \rightarrow \langle \gamma \rangle \backslash \mathbb{H}^2$  est la projection canonique.

Par conséquent, tant que le rayon euclidien de  $B_h(m)$  est inférieur à la largeur  $\ell$  de la bande  $S$ , alors  $B_h(m)$  peut être considérée comme une boule de rayon  $h$  dans  $\mathbb{H}^2$ . Lorsque le rayon est plus grand que  $\ell$ , i.e. lorsque  $t \geq \log(\ell/2) - \log(\sinh(h))$ , alors, la boule se recouvre elle-même et peut être représentée dans  $S$  par

$$B_h(m) = \bigcup_{j=-1}^1 \{(x', y') \in S; |e^t \cosh(h) - x'|^2 + |y + j\ell - y'|^2 \leq e^{2t} \sinh(h)^2\} \quad (5.2.5)$$

où l'on a posé  $m = (e^t, y) \in S$  (voir figures 5.2.3, 5.2.4). En particulier, si  $(x = e^t, y = \ell/2)$ , alors

$$B_h(m) = \{0 \leq y' \leq \ell; |x' - e^t \cosh(h)| \leq \sqrt{e^{2t} \sinh^2(h) - |y' - \ell/2|^2}\}.$$

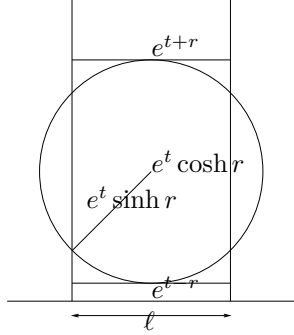


FIGURE 5.2.3 – La boule hyperbolique de rayon  $r$  est tangente à elle-même lorsque son centre se situe à  $t = \log(\ell/2 \sinh(r))$ . Pour  $t > \log(\ell/2 \sinh(r))$  la boule se recouvre elle-même.

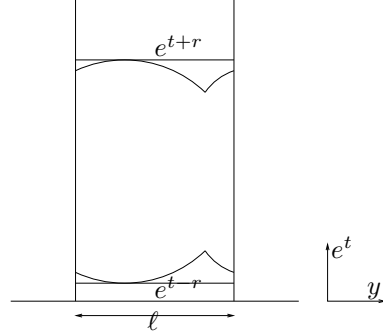


FIGURE 5.2.4 – La boule hyperbolique de rayon  $r$  pour  $t > \log(\ell/2 \sinh(r))$  avec un centre translaté horizontalement.

Nous sommes maintenant en mesure de donner une formule explicite de l'opérateur dans la pointe hyperbolique. On utilise les coordonnées  $(t, y)$  dans la bande  $S$  définie ci-dessus, de sorte que  $E_0 := \langle \gamma \rangle \backslash S = \{(e^t, y) \in (x_0, \infty) \times (\mathbb{R}/\ell\mathbb{Z})\}$ , pour un certain  $x_0 > 0$ . On remarque que pour des raisons de symétrie, le volume d'une boule centrée en un point  $(e^t, y)$  de  $E_0$  est indépendant de  $y$ . Par abus de notation, on notera  $B_h(t, y)$  la boule géodésique de  $E_0$  centrée en  $(e^t, y)$  et de rayon  $h$  et  $|B_h(t)|$  son volume.

Toute fonction  $u \in L^2(M)$  supportée dans  $E_0$  se décompose partiellement en série de Fourier

$$u(t, y) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} u_k(t) e^{\frac{2ik\pi y}{\ell}} \quad (5.2.6)$$

avec des  $u_k$  supportés dans  $\{t > t_0 = \ln(x_0)\}$ . Un calcul explicite montre que l'opérateur  $T_h$  se décompose bien en série de Fourier :

$$T_h u(t, y) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} T_{h,k}(u_k)(t) e^{\frac{2ik\pi y}{\ell}} \quad (5.2.7)$$

Nous allons calculer ces opérateurs  $T_{h,k}$ . La première expression est obtenue en intégrant d'abord sur les lignes verticales de la boule géodésique.

### Première expression de l'opérateur

Pour  $t > t_0$ , on note  $l(t) = \min(\frac{\ell}{2}, e^t \sinh(h))$  et pour  $|z| < \sinh(h)$  on note  $t_{\pm}(z) = \log(\cosh(h) \pm \sqrt{\sinh^2(h) - |z|^2})$ . Un calcul simple montre que (5.2.7) est vérifiée avec  $T_{h,k}$  défini par

$$T_{h,k} v(t) = \frac{1}{|B_h(t)|} \int_{-l(t)e^{-t}}^{l(t)e^{-t}} e^{\frac{2\pi i k z e^t}{\ell}} \int_{t_-(z)}^{t_+(z)} v(t+T) e^{-T} dT dz. \quad (5.2.8)$$

En utilisant le théorème de Plancherel et en calculant la transformée de Fourier de  $e^{-T} \mathbb{1}_{[t_-, t_+]}(T)$ , on montre que

$$T_{h,k}v(t) = \int e^{it\xi} \sigma_k(t, \xi) \hat{v}(\xi) d\xi \quad (5.2.9)$$

où

$$\sigma_k(t, \xi) = \frac{1}{|B_h(t)|} \int_{-l(t)e^{-t}}^{l(t)e^{-t}} e^{\frac{2\pi i k z e^t}{\ell}} \sigma(z, \xi) dz \quad (5.2.10)$$

avec

$$\sigma(z, \xi) = \frac{(\cosh(h) + \sqrt{\sinh(h)^2 - z^2})^{1+i\xi} - (\cosh(h) - \sqrt{\sinh(h)^2 - z^2})^{1+i\xi}}{(1+i\xi)(1+z^2)^{1+i\xi}}. \quad (5.2.11)$$

**Remarque 5.2.3** En prenant  $u = 1$  dans les calculs précédents, on obtient

$$|B_h(t, y)| = \int_{-l(t)e^{-t}}^{l(t)e^{-t}} \frac{2\sqrt{\sinh(h)^2 - z^2}}{1+z^2} dz. \quad (5.2.12)$$

Pour  $t > \log(\ell/2 \sinh(h))$ , on en déduit l'estimation

$$|B_h(t, y)| = 2\ell \sinh(h) e^{-t} + O(e^{-3t}/\sinh(h)) = |R_h(t, y)| + O(e^{-3t}/\sinh(h)) \quad (5.2.13)$$

où  $|R_h(t, y)|$  désigne le volume de  $R_h(t, y) := \{(e^{t'}, y') \in S; |t' - t| < h\}$ , qui est le plus petit cylindre de la pointe contenant  $B_h(t, y)$ .

De plus, on voit facilement qu'il existe  $C > 0$  tel que pour tout  $t \geq \log(\ell/2 \sinh(h))$ ,  $|B_h(t)| \geq C h e^{-t}$ .

### Seconde expression de l'opérateur

Si l'on intègre d'abord suivant les lignes horizontales dans la formule (5.2.1), on obtient la formule suivante pour les opérateurs  $T_{h,k}$  :

$$T_{h,k}v(t) = \frac{1}{|B_h(t)|} \int_{-h}^h v(t+T) \int_{-\alpha(t,T)}^{\alpha(t,T)} e^{2ik\pi z e^t/\ell} e^{-T} dz dT \quad (5.2.14)$$

où  $\alpha(t, T) = \min(\frac{\ell}{2}, e^t \sqrt{\sinh^2(h) - |\cosh(h) - e^T|^2})$ .

### 5.2.2 Etude du spectre essentiel

Dans cette partie nous ébauchons la preuve du point i) du Théorème 5.2.1. On commence par conjuguer l'opérateur  $T_h$  de manière à le faire opérer sur  $L^2(M, dv_g)$ . Plus précisément,  $T_h$  est unitairement équivalent à l'opérateur  $\tilde{T}_h$  autoadjoint sur  $L^2(M, dv_g)$  et défini par

$$\tilde{T}_h f(m) := \frac{1}{|B_h(m)|^{\frac{1}{2}}} \int_{B_h(m)} f(m') \frac{1}{|B_h(m')|^{\frac{1}{2}}} dv_g(m') \quad (5.2.15)$$

Comme cet opérateur propage le support des fonctions d'au plus  $h$ , en utilisant les variables  $(t, y)$  de la pointe, on voit facilement que  $\tilde{T}_h = \mathbb{1}_{[t_0, \infty[}(t) \tilde{T}_h \mathbb{1}_{[t_0, \infty[}(t) + R$  avec  $R$  de classe Hilbert-Schmidt. Par suite le spectre essentiel de  $\tilde{T}_h$  est égal à celui de  $\mathbb{1}_{[t_0, \infty[}(t) \tilde{T}_h \mathbb{1}_{[t_0, \infty[}(t)$ . L'idée

est alors d'approcher cet opérateur par un opérateur possédant plus de symétries. On introduit l'opérateur  $\bar{T}_h$  agissant sur  $L^2(M, dv_g)$  et défini par

$$\bar{T}_h u(t, y) = \frac{1}{|R_h(t)|^{\frac{1}{2}}} \mathbb{1}_{[t_0, \infty)}(t) \int_{y-\frac{\ell}{2}}^{y+\frac{\ell}{2}} \int_{t-h}^{t+h} \mathbb{1}_{[t_0, \infty)}(t') \frac{u(t', y')}{|R_h(t')|^{\frac{1}{2}}} e^{-t'} dt' dy' \quad (5.2.16)$$

où  $|R_h(t)| = 2\ell e^{-t} \sinh(h)$  est la mesure du rectangle  $t' \in [t-h, t+h]$  comme dans la remarque 5.2.3. On déduit alors du Lemme de Schur que l'opérateur  $\mathbb{1}_{[t_0, \infty)}(t) \bar{T}_h \mathbb{1}_{[t_0, \infty)}(t) - \bar{T}_h$  a une norme  $L^2$  bornée par  $Ch^{-2}e^{-2t_0}$ . En faisant  $t_0 \rightarrow \infty$ , on se ramène donc à l'étude du spectre essentiel de  $\bar{T}_h$ . Or cet opérateur se diagonalise de la même manière que  $T_h$  via les séries de Fourier comme dans la formule (5.2.8). De plus, le domaine d'intégration étant symétrique en  $t$  et  $y$  il est identiquement nul sur tous les modes  $k \neq 0$ . Par suite la norme de  $\bar{T}_h$  est bornée par la norme de l'opérateur suivant agissant sur  $L^2(\mathbb{R}, dt)$  :

$$\mathcal{T}_h v(t) = \frac{\mathbb{1}_{[t_0, \infty)}(t)}{2 \sinh(h)} \int_{t-h}^{t+h} \mathbb{1}_{[t_0, \infty)}(t') f(t') dt' \quad (5.2.17)$$

Or, cet opérateur peut aussi s'écrire  $\mathcal{T}_h = \mathbb{1}_{[t_0, \infty)} \frac{\sin(hD_t)}{\sinh(h)D_t} \mathbb{1}_{[t_0, \infty)}$ . La description du spectre essentiel est alors immédiate.

### 5.2.3 Preuve du trou spectral

#### Absence de spectre près de $-1$

On commence par montrer que le spectre de  $T_h$  est bien séparé de  $-1$ . On recouvre  $M$  par des ouverts  $\omega_j$  de diamètre  $h$  comme dans la section 4.2. En utilisant la forme spécifique de la forme volume, on démontre que  $\text{vol}(\omega_j) \geq C \max_{m \in \omega_j} |B_h(m)|$ . En utilisant cette estimation, on montre facilement qu'il existe  $\delta > 0$  indépendant de  $h$  tel que

$$\langle (1 + T_h)u, u \rangle_{L^2(M, dv_h)} \geq 2\delta \|u\|_{L^2(M, dv_h)}^2. \quad (5.2.18)$$

Par suite  $\text{Spec}(T_h) \cap [-1, -1 + \delta] = \emptyset$ .

#### Découpage de la variété et recollage des estimations

Passons maintenant à la preuve de la borne inférieure du trou spectral :  $g(h) \geq ch^2$ . On tente ici de mettre en oeuvre un argument de chemin dans l'esprit de (4.2.14), (4.2.15). Or, le fait que la variété est non-bornée empêche d'appliquer directement cette méthode (d'un point de vue technique, le diamètre de l'ouvert apparaît clairement dans l'estimation (4.2.15)). Pour surmonter cette difficulté, on va découper la variété en morceau compact et pointes hyperboliques, démontrer des inégalités variationnelles ad hoc sur chaque morceau et enfin recoller les estimations.

Nous devons montrer qu'il existe  $C > 0$  tel que pour tout  $u \in L^2(M, dv_h)$ , on ait :

$$\mathcal{V}_h(u) \leq \frac{C}{h^2} \mathcal{E}_h(u) \quad (5.2.19)$$

Nous allons décomposer  $\mathcal{V}_h$  en accord avec la géométrie de  $M$ . Pour  $0 \leq a < c < b \leq \infty$ , on

définit

$$\begin{aligned}
\mathcal{V}_h^{[a,b]}(f) &= \frac{1}{2} \int_{t(m) \in [a,b], t(m') \in [a,b]} (f(m) - f(m'))^2 d\nu_h(m) d\nu_h(m'), \\
\mathcal{I}_h^c(f) &= \frac{1}{2} \int_{t(m) \in [a,c], t(m') \in [c,b]} (f(m) - f(m'))^2 d\nu_h(m) d\nu_h(m') \\
\mathcal{E}_h^{[a,b]}(f) &= \frac{1}{2Z_h} \int_{t(m'), t(m) \in [a,b], d(m, m') < h} (f(m) - f(m'))^2 dv_g(m) dv_g(m').
\end{aligned} \tag{5.2.20}$$

On a de manière évidente :

$$\mathcal{V}_h^{[a,b]}(f) = \mathcal{V}_h^{[a,c]}(f) + \mathcal{V}_h^{[c,b]}(f) + 2\mathcal{I}_h^c(f) \tag{5.2.21}$$

et l'on veut un contrôle du terme d'interaction  $\mathcal{I}_h$  en fonction de la variance. On remarque que

$$\mathcal{I}_h^c(f) = \frac{1}{\nu_h(C_c)} \int_{s \in C_c} I_h^c(f) d\nu_h(s) \tag{5.2.22}$$

où  $C_c := \{m \in M; c-1 < t(m) < c+1\}$ . On en déduit

$$\mathcal{I}_h^c(f) \leq 2 \int_{s \in C_c} \int_{\substack{t(m) \in [a,c], \\ t(m') \in [c,b]}} (f(m) - f(s))^2 + (f(s) - f(m'))^2 d\nu_h(m) d\nu_h(m') \frac{d\nu_h(s)}{\nu_h(C_c)}, \tag{5.2.23}$$

et par suite

$$\mathcal{I}_h^c(f) \leq \frac{2\nu_h(t(m) \in [c, b])}{\nu_h(C_c)} V_h^{[a, c+1]}(f) + \frac{2\nu_h(t(m) \in [a, c])}{\nu_h(C_c)} V_h^{[c-1, b]}(f) \tag{5.2.24}$$

pour tout  $a+1 \leq c \leq b-1$ .

On remarque ensuite qu'il existe des constantes  $c_1, c_2 > 0$  indépendantes de  $h$  telles que les mesures  $d\nu_h$  et  $dv_g$  vérifient l'inégalité suivante :

$$c_1 \min(1, h^{-1}e^{-t(m)}) \leq \frac{d\nu_h}{dv_g} \leq c_2 \min(1, h^{-1}e^{-t(m)}) \tag{5.2.25}$$

Combinée avec (5.2.21) et (5.2.24), on en déduit qu'il existe  $C > 0$  tel que

$$\mathcal{V}_h^{[a,b]}(f) \leq C \left( \mathcal{V}_h^{[a, c+1]}(f) + e^{c-a} \frac{\min(1, h^{-1}e^{-a})}{\min(1, h^{-1}e^{-c})} \mathcal{V}_h^{[c-1, b]}(f) \right). \tag{5.2.26}$$

En utilisant cette estimation avec  $c = t_0$  indépendant de  $h$ , on obtient

$$\mathcal{V}_h(f) \leq C \left( \mathcal{V}_h^{[0, t_0]}(f) + e^{t_0} \mathcal{V}_h^{[t_0, \infty]}(f) \right) \tag{5.2.27}$$

Par ailleurs, on a trivialement l'inégalité

$$\mathcal{E}_h(f) \geq \frac{1}{4} \left( \mathcal{E}_h^{[0, t_0+1]}(f) + \mathcal{E}_h^{[t_0-1, \infty]}(f) \right), \tag{5.2.28}$$

Au regard des estimations précédentes et comme  $t_0$  est indépendant de  $h$ , il reste à monter que

$$\mathcal{E}_h^{[0, t_0]}(f) \geq Ch^2 V_h^{[0, t_0]}(f), \quad \mathcal{E}_h^{[t_0-1, \infty]}(f) \geq Ch^2 V_h^{[t_0-1, \infty]}(f). \tag{5.2.29}$$

L'estimation relative à la partie compacte  $\mathcal{E}_h^{[0,t_0]}$  se montrera à partir des résultats de la section 4.1. Pour ce qui concerne l'estimation de la partie non compacte, on a besoin de se ramener à une marche aléatoire sur une variété modèle. On rappelle que  $E_0 = [t_0 - 1, \infty[ \times \mathbb{R} / \ell\mathbb{Z}$  est muni de la métrique  $g = dt^2 + e^{-2t} dy^2$ . On suppose sans perte de généralité que  $t_0 = 1$ . On considère la surface  $W := \mathbb{R}_t \times (\mathbb{R} / \ell\mathbb{Z})_y$ , et on voit  $E_0$  comme le sous-ensemble  $\{t > 0\}$  de  $W$  (voir figure 5.2.5). On étend ensuite la métrique  $g$  à  $W$  en posant  $g := dt^2 + e^{-2\mu(t)} dy^2$  où  $\mu(t)$  est une fonction régulière sur  $\mathbb{R}$  égale à  $|t|$  sur  $\{t > 0\} \cup \{t < -1\}$  et telle que  $e^{-\mu(t)} \geq c_0 e^{-t}$  lorsque  $t \in [-1, 0]$  pour une certaine constante  $c_0 > 0$ . En particulier,  $e^{-\mu(t)}$  est de type RTE et il existe une constante  $C > 0$  telle que

$$\forall t \in \mathbb{R}, \frac{1}{C} e^{-\mu(t)} \leq e^{-\mu(-t)} \leq C e^{-\mu(t)} \quad (5.2.30)$$

On note  $d(m, m')$  la distance géodésique sur  $W$ ,  $dv_g$  la forme volume, et  $|B_h(m)| = v_g(B(m, h))$ . On considère la mesure de probabilité sur  $W$  :  $d\nu_h^W = \frac{|B_h(m)|}{Z_h^W} dv_g(m)$ , où  $Z_h^W \in [h^2/C, Ch^2]$  (pour un certain  $C > 1$ ) est une constante de renormalisation et pour  $g \in L^2(W)$ , on définit

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_h^W(g) &:= \frac{1}{Z_h^W} \int_{m, m' \in W, d(m, m') < h} (g(m) - g(m'))^2 dv_g(m) dv_g(m') \\ \mathcal{V}_h^W(g) &:= \int_{m, m' \in W} (g(m) - g(m'))^2 d\nu_h^W(m) d\nu_h^W(m'). \end{aligned}$$

Toute fonction  $f \in L^2(E_0)$  peut être prolongée en une fonction  $f^s \in L^2(W)$ , symétrique par rapport à l'involution  $t \mapsto -t$ . En découpant  $W \times W$  en 4 régions ( $\{t(m) > 0, t(m') > 0\} \cup \{t(m) > 0, t(m') < 0\} \cup \dots$ ) et en utilisant les symétries de la variété ainsi que les estimations sur la fonction  $\mu(t)$ , on montre que

$$\mathcal{E}_h^{[0, \infty)}(f) \leq \mathcal{E}_{\frac{h}{2}}^W(f^s) \leq C \mathcal{E}_h^{[0, \infty)}(f). \quad (5.2.31)$$

En particulier l'inégalité de droite dans (5.2.29) est une conséquence immédiate de la proposition suivante :

**Proposition 5.2.4** *Il existe  $C > 0$  et  $h_0 > 0$  tels que pour tout  $f \in L^2(W)$  et pour tout  $h \in ]0, h_0]$ , on a :*

$$Ch^2 \mathcal{V}_h^W(f) \leq \mathcal{E}_h^W(f) \quad (5.2.32)$$

La preuve de cette proposition fera l'objet de la section suivante.

Pour ce qui est de la preuve de l'inégalité de gauche dans (5.2.29), on utilise des arguments proche de ceux utilisés pour traiter la région non-compacte. On commence par définir une surface  $X = M_0 \sqcup M_0$ , obtenue en doublant  $M_0$  le long du cercle  $t = t_0$ . On munit  $X$  d'une structure régulière et d'une métrique qui étend  $g$ . On peut alors considérer l'opérateur de marche aléatoire naturel sur  $X$  :  $T_h^X$  et en travaillant comme pour la preuve de (5.2.31), on voit qu'il suffit de montrer que qu'il existe  $C > 0$  tel que pour tout  $f \in L^2(X)$ , on a

$$\langle (1 - T_h^X)f, f \rangle_{L^2(X, d\nu_h^X)} \geq Ch^2 (\|f\|_{L^2(X, d\nu_h^X)}^2 - \langle f, 1 \rangle_{L^2(X, d\nu_h^X)}^2)$$

Or, la variété  $X$  étant compacte, cette inégalité est une conséquence immédiate du Théorème 4.1.1

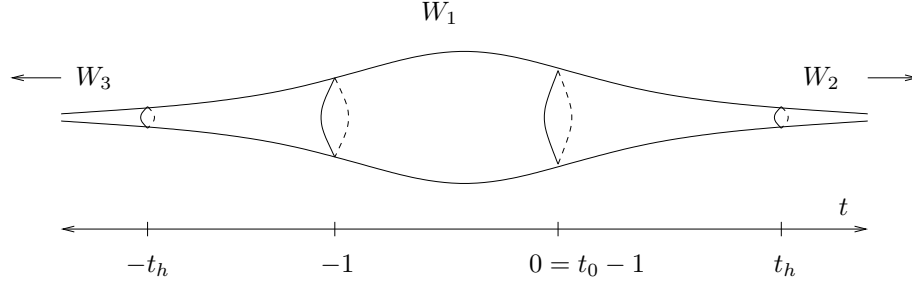


FIGURE 5.2.5 – La surface de révolution  $W$ , qui est un "doublement" de la pointe hyperbolique  $E_0 = \{t \geq t_0 - 1 = 0\}$  dans ces coordonnées. Pour l'étude de la section suivante, on écrit  $W = W_1 \cup W_2 \cup W_3$ , où  $W_2, W_3$  sont les régions où  $|t| \geq t_h = \log(\ell/2 \sinh(h)) - 1$ .

### Trou spectral pour une surface de révolution

On étudie dans cette section l'opérateur de marche aléatoire semiclassique sur la surface  $W$ . Cette surface peut être vue comme un quotient  $\langle y \rightarrow y + \ell \rangle \mathbb{R}^2$  de  $\mathbb{R}^2$  équipé de la métrique  $dt^2 + e^{-2\mu(t)} dy^2$  par le groupe des isométries  $G$  engendré par une translation horizontale. L'opérateur de marche aléatoire naturelle  $T_h^W$  on  $W$ , est défini par

$$T_h^W f(m) = \frac{1}{|B_h(m)|} \int_{B_h(m)} f(m') dv_g(m') \quad (5.2.33)$$

Les fonctionnelles  $\mathcal{E}_h^W$  et  $\mathcal{V}_h^W$  définies plus haut sont respectivement la forme de Dirichlet et la variance associées à  $T_h^W$  :  $\mathcal{E}_h^W(f) = \langle (1 - T_h^W)f, f \rangle_{L^2(W, d\nu_h^W)}$  et  $\mathcal{V}_h^W(f) = \|f\|_{L^2(W, d\nu_h^W)}^2 - \langle f, 1 \rangle_{L^2(W, d\nu_h^W)}^2$ .

Nous avons vu à la section 5.2.1 que l'opérateur  $T_h^W$  se diagonalise en utilisant les séries de Fourier dans la variable  $y$  pour  $t$  assez grand. Cette décomposition s'étend à la variété tout entière du fait de ses symétries. Plus précisément, la boule géodésique s'écrit

$$B_h(t, y) := \{(t', y'); |t - t'| \leq h, |y - y'| \leq \alpha_h(t, t')\} \quad (5.2.34)$$

pour une certaine fonction  $\alpha_h(t, t')$  vérifiant  $\alpha_h(t, t-h) = \alpha_h(t, t+h) = 0$  (condition correspondant au bas et haut de la boule) et  $\alpha_h(t, t) = he^{-\mu(t)}$  (condition correspondant au milieu de la boule). Pour  $f(t, y) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} f_k(t) e^{2ik\pi y/\ell}$  supportée dans  $|t| < t_0 + 2$ , on a  $T_h^W f = \sum_{k \in \mathbb{Z}} (T_{h,k}^W f_k)(t) e^{2ik\pi y/\ell}$  avec

$$\begin{aligned} T_{h,k}^W f_k(t) &= \frac{2}{|B_h(t)|} \int_{t-h}^{t+h} f_k(t') \frac{\sin(2\pi k \alpha_h(t, t')/\ell)}{2\pi k \alpha_h(t, t')/\ell} \alpha_h(t, t') e^{-\mu(t')} dt' \\ T_{h,0}^W f_0(t) &= \frac{2}{|B_h(t)|} \int_{t-h}^{t+h} \alpha_h(t, t') f_0(t') e^{-\mu(t')} dt' \end{aligned} \quad (5.2.35)$$

En particulier, on a

$$|B_h(t)| = \int_{t-h}^{t+h} 2\alpha(t, t') e^{-\mu(t')} dt'. \quad (5.2.36)$$

De plus, au regard de la section 5.2.1, ces formules s'étendent à  $W$  tout entier en posant

$$\alpha_h(t, t') = \min \left( e^t \sqrt{\sinh(h)^2 - (\cosh(h) - e^{t'-t})^2}, \ell/2 \right) \quad (5.2.37)$$

En utilisant la formule (5.2.35) et l'inégalité  $|\sin(x)/x| \leq 1 - \epsilon \min(x^2, 1)$  pour  $\epsilon > 0$  assez petit, on montre facilement le

**Lemme 5.2.5** *Il existe  $\epsilon > 0, h_0 > 0$  tel que pour tout  $k \neq 0, 0 < h \leq h_0$  et  $f \in L^\infty(\mathbb{R})$*

$$\|T_{h,k}^W f\|_{L^2(\mathbb{R}, |B_h(t)| e^{-\mu(t)} dt)} \leq (1 - \epsilon h^2) \|f\|_{L^2(\mathbb{R}, |B_h(t)| e^{-\mu(t)} dt)}. \quad (5.2.38)$$

Passons maintenant à l'analyse de l'opérateur  $T_{h,0}^W$ , agissant sur les modes indépendants de  $y$ . On pose  $t_h = \log(\ell/2 \sinh(h)) - 1$ , et on découpe à nouveau la variété en 3 régions (voir figure 5.2.5) :

$$W_1 := \{(t, y) \in (-t_h, t_h) \times \mathbb{R}/\ell\mathbb{Z}\}$$

$$W_2 := \{(t, y) \in (t_h, \infty) \times \mathbb{R}/\ell\mathbb{Z}\}, \text{ et } W_3 := \{(t, y) \in (-\infty, -t_h) \times \mathbb{R}/\ell\mathbb{Z}\}.$$

Pour  $i = 1, 2, 3$ , on définit les fonctionnelles associées agissant sur les fonctions  $f \in L^2(W, d\nu_h)$  indépendantes de la variable  $y$ .

$$\mathcal{E}_h^i(f) := \frac{1}{2Z_h} \int_{m, m' \in W_i, d(m, m') < h} (f(m) - f(m'))^2 d\nu_g(m) d\nu_g(m')$$

$$\mathcal{V}_h^i(f) := \frac{1}{2} \int_{m, m' \in W_i} (f(m) - f(m'))^2 d\nu_h(m) d\nu_h(m').$$

En utilisant des arguments similaires à ceux invoqués pour prouver (5.2.27) et (5.2.28), on voit facilement, en utilisant (5.2.38), que (5.2.32) sera prouvée, dès lors qu'on aura établi qu'il existe  $C > 0$  et  $h_0 > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  et pour tout  $f \in L^2(W, d\nu_h)$  constante dans la variable  $y \in \mathbb{R}/\ell\mathbb{Z}$ , on a

$$\mathcal{E}_h^1(f) \geq Ch^2 \mathcal{V}_h^1(f), \text{ et } \mathcal{E}_h^i(f) \geq Ch^2 e^{t_h} \mathcal{V}_h^i(f) \text{ pour } i = 2, 3. \quad (5.2.39)$$

On commence par traiter le cas  $i = 2$ . Le cas  $i = 3$  est identique.

**Lemme 5.2.6** *Il existe  $C > 0$  tel que pour tout  $f \in L^2(W_2, d\nu_h)$  constante dans la variable  $y \in \mathbb{R}/\ell\mathbb{Z}$ , on ait*

$$\mathcal{E}_h^2(f) \geq Ch^2 e^{t_h} \mathcal{V}_h^2(f). \quad (5.2.40)$$

*Preuve.* On identifie l'espace des fonctions  $f \in L^2(W_2)$  constantes dans la variable  $y \in \mathbb{R}/\ell\mathbb{Z}$  à l'espace  $L^2([t_h, \infty[)$ . En symétrisant le problème de manière similaire à la construction de  $W$ , on se ramène à montrer une inégalité du type

$$\langle (1 - T_{\frac{\rho}{2}}^\rho) f, f \rangle_{L^2(\mathbb{R}, d\nu_h^\rho)} \geq Ch^2 (\|f\|_{L^2(\mathbb{R}, d\nu_h^\rho)}^2 - \langle f, 1 \rangle_{L^2(\mathbb{R}, d\nu_h^\rho)}^2). \quad (5.2.41)$$

où  $\rho = \rho(t)dt$  est mesure de densité régulière sur  $\mathbb{R}$ , égale à  $e^{-t}$  sur  $[-1, +\infty[$  et  $e^{-|t|}dt$  sur  $] - \infty, -2]$ ;  $d\nu_h^\rho = \rho([t-h, t+h])\rho/Z_h^\rho$  est une mesure de probabilité et  $T_h^\rho$  est l'opérateur de marche aléatoire naturellement associé :

$$T_h^\rho f(t) := \frac{1}{\rho([t-h, t+h])} \int_{|t-t'| \leq h} f(t') \rho(t') dt'. \quad (5.2.42)$$

Or, la densité  $\rho(t)$  est du type RTE étudié dans le chapitre précédent. On déduit donc du Théorème 5.1.3 l'estimation (5.2.40).  $\square$

On termine cette section par la preuve du cas  $i = 1$  dans (5.2.39).



**Lemme 5.2.7** *Il existe  $C > 0$  tel que pour tout  $f \in C_0^\infty(W_1)$  ne dépendant que de  $t$*

$$\mathcal{E}_h^1(f) \geq Ch^2 \mathcal{V}_h^1(f).$$

*Preuve.* L'idée de la preuve est assez proche de celle du Lemme 5.2.6. Dans le cas de  $W_2$ , les fonctions considérées sont définies sur un demi axe  $[t_h, \infty[$  et il est naturel de les prolonger par une sorte de symétrie et d'étudier l'opérateur de marche aléatoire associé. Ici, les fonctions sont définies sur un segment borné  $[-t_h, t_h]$  muni d'une mesure exponentiellement décroissante. L'idée principale consiste à périodiser les fonctions pour se ramener à nouveau à un problème sur  $\mathbb{R}$ . La somme des fonctionnelles partielles (relatives à chaque intervalle  $[(2j-1)t_h, (2j+1)t_h]$ ) est convergente grâce à un terme exponentiellement décroissant venant de la mesure. On se ramène ainsi à démontrer un inégalité fonctionnelle du type (5.2.41) pour un densité  $\rho$  qui est à nouveau de type RTE. Le Théorème 5.1.3 permet à nouveau de conclure.  $\square$

### Borne supérieure du trou spectral

On donne ici les idées utilisées pour prouver l'inégalité de droite dans (5.2.2). On démontre en fait un résultat un peu plus fort.

**Théorème 5.2.8** *Soient  $0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq \dots \leq \lambda_K$  les valeurs propres  $L^2$  du Laplacien  $-\Delta_g$  sur  $(M, g)$  qui sont contenues dans  $[0, 1/4)$  et  $\lambda_{K+1}, \dots, \lambda_{K+L}$  celles qui appartiennent à  $[1/4, 4/3)$ . Pour tout  $c > 0$ , il existe  $h_0$  tel que pour tout  $h \in ]0, h_0]$ ,  $K+1 \leq k \leq k+L$*

$$\# \left( \text{Spec}(1 - T_h) \cap \left[ \frac{\lambda_k h^2}{8} - ch^4, \frac{\lambda_k h^2}{8} + ch^4 \right] \right) \geq \dim \ker(\Delta_g - \lambda_k).$$

*Pour tout  $c > 0$  il existe  $h_0$  tel que pour tout  $0 < h < h_0$ ,  $0 < k \leq K$ ,*

$$\# \left( \text{Spec}(1 - T_h) \cap \left[ \frac{\lambda_k h^2}{8} - ch^{2+\sqrt{1/4-\lambda_k}}, \frac{\lambda_k h^2}{8} + ch^{2+\sqrt{1/4-\lambda_k}} \right] \right) \geq \dim \ker(\Delta_g - \lambda_k).$$

La première étape dans la preuve de ce résultat consiste à obtenir une approximation de l'action de l'opérateur de marche aléatoire sur des fonctions régulières.

**Lemme 5.2.9** *Soit  $t_0 > 0$  fixé tel que la métrique soit de courbure constante dans  $\{t > T_0/2\}$ . Soient  $\chi_h^1$  et  $\chi_h^2$  des fonctions régulières supportées respectivement dans  $\{e^{t_0} < e^t < \frac{\ell}{2 \sinh(h)} - 1\}$  et  $\{\frac{\ell}{2 \sinh(h)} - 2 < e^t < \frac{A}{2 \sinh(h)}\}$  pour un certain  $A \gg 1$ . Alors, il existe  $C > 0$  et  $h_0 > 0$  tels que pour tout  $h \in ]0, h_0]$  on a les estimations suivantes*

*i) Pour tout  $\psi \in C_0^\infty(M)$  supportée dans  $\{t < 2t_0\}$ , on a*

$$\left\| T_h \psi - \left( \psi - \frac{h^2}{8} \Delta_g \psi \right) \right\|_{L^2(M)} \leq Ch^4 \|\psi\|_{H^4(M)}. \quad (5.2.43)$$

*ii) Pour tout  $\psi \in C^\infty(M)$ , on a*

$$\left\| T_h(\psi \chi_h^1) - \left( \psi \chi_h^1 - \frac{h^2}{8} \Delta_g(\psi \chi_h^1) \right) \right\|_{L^2(M)} \leq Ch^4 \|\chi_h^1 \psi\|_{H^4(M)} \quad (5.2.44)$$

*iii) Pour tout  $\psi \in C^\infty(M)$ , on a*

$$\|T_h(\chi_h^2 \psi) - \chi_h^2 \psi\|_{L^2(M)} \leq Ch^2 \|\chi_h^2 \psi\|_{H^2(M)} \quad (5.2.45)$$

*Preuve.* Les inégalités (5.2.43) et (5.2.44) sont une conséquence immédiate de l'approximation de l'opérateur de marche aléatoire par une fonction du Laplacien dans le cas d'une variété compacte sans bord, cf Lemme 4.1.6.

Dans le cas où les boules de rayons  $h$  s'auto-recouvrent, on fait appel à la formule (5.2.8) dans laquelle on écrit le développement de Taylor  $v(t+T) = v(t) + T\partial_t v(t) + O(T^2)$ . Un simple calcul permet d'établir (5.2.45).  $\square$

Le second ingrédient dans la preuve du Théorème 5.2.8 est l'obtention de bonnes estimations des fonctions propres du Laplacien. On a le

**Lemme 5.2.10 (Müller [Mül92])** *Soit  $T \gg 1$  et  $\chi_T$  une fonction régulière supportée dans  $\{t \geq T\}$ . Soient  $\psi_j$  les fonctions propres associées aux valeurs propres  $\lambda_j$  normalisées dans  $L^2(M, dv_g)$ . Pour  $j > K$ , on a*

$$\|\chi_T \psi_j\|_{L^2(M, dv_g)} \leq C_{N,j} e^{-NT}, \quad \forall N \in \mathbb{N}_0 \quad (5.2.46)$$

les constantes  $C_{N,j}$  ne dépendant que de  $N, j$ . Pour  $j \leq K$ , on a

$$\|\chi_T \psi_j\|_{L^2(M, dv_g)} \leq C_j e^{-T\sqrt{1/4-\lambda_j}}, \quad (5.2.47)$$

les constantes  $C_j$  ne dépendant que de  $j$ .

En utilisant les Lemmes 5.2.9 et 5.2.10, on démontre facilement que pour tout  $K < k < K+L$

$$\|T_h \psi_k - (1 - h^2 \frac{\lambda_k}{8}) \psi_k\|_{L^2} \leq Ch^4$$

et pour tout  $k \leq K$ ,

$$\|T_h \psi_k - (1 - h^2 \frac{\lambda_k}{8}) \psi_k\|_{L^2} \leq Ch^{2+\sqrt{\frac{1}{4}-\lambda_k}}.$$

En combinant ces estimations avec le principe du min-max, on achève facilement la preuve du Théorème 5.2.8.

# Bibliographie

- [ABR08] Ivana Alexandrova, Jean-François Bony, and Thierry Ramond. Semiclassical scattering amplitude at the maximum of the potential. *Asymptot. Anal.*, 58(1-2) :57–125, 2008. 36
- [AHS78] J. Avron, I. Herbst, and B. Simon. Schrödinger operators with magnetic fields. I. General interactions. *Duke Math. J.*, 45(4) :847–883, 1978. 28, 31
- [BBR07] Jean-François Bony, Vincent Bruneau, and Georgi Raikov. Resonances and spectral shift function near the Landau levels. *Ann. Inst. Fourier (Grenoble)*, 57(2) :629–671, 2007. 29
- [BD07] Vincent Bruneau and Mouez Dimassi. Weak asymptotics of the spectral shift function. *Math. Nachr.*, 280(11) :1230–1243, 2007. 29
- [BFRZ] J.-F. Bony, S. Fulié, T. Ramond, and M. Zerzeri. Spectral projection, residue of the scattering amplitude and schrödinger group expansion for barrier top resonances. *Ann. Institut Fourier, à paraître*. 27
- [BGT04] N. Burq, P. Gérard, and N. Tzvetkov. On nonlinear Schrödinger equations in exterior domains. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 21(3) :295–318, 2004. 51
- [BH08] Jean-François Bony and Dietrich Häfner. Decay and non-decay of the local energy for the wave equation on the de Sitter-Schwarzschild metric. *Comm. Math. Phys.*, 282(3) :697–719, 2008. 27
- [Bil68] P. Billingsley. *Convergence of probability measures*. John Wiley & Sons Inc., New York, 1968. 82
- [BM04] J.-F. Bony and L. Michel. Microlocalization of resonant states and estimates of the residue of the scattering amplitude. *Comm. Math. Phys.*, 246(2) :375–402, 2004. 9, 18, 20, 26
- [Bon01] J.-F. Bony. Résonances dans des domaines de taille  $h$ . *Internat. Math. Res. Notices*, (16) :817–847, 2001. 27
- [Bon02] J.-F. Bony. Minoration du nombre de résonances engendrées par une trajectoire fermée. *Comm. Partial Differential Equations*, 27(5-6) :1021–1078, 2002. 27
- [BPR04] V. Bruneau, A. Pushnitski, and G. Raikov. Spectral shift function in strong magnetic fields. *Algebra i Analiz*, 16(1) :207–238, 2004. 29, 32, 34
- [BR04] Vincent Bruneau and Georgi D. Raikov. High energy asymptotics of the magnetic spectral shift function. *J. Math. Phys.*, 45(9) :3453–3461, 2004. 29
- [Bur02] N. Burq. Lower bounds for shape resonances widths of long range Schrödinger operators. *Amer. J. Math.*, 124(4) :677–735, 2002. 17
- [CE88] T. Cazenave and M. J. Esteban. On the stability of stationary states for nonlinear Schrödinger equations with an external magnetic field. *Mat. Apl. Comput.*, 7(3) :155–168, 1988. 49, 51

- [CGM10] H. Christianson, C. Guillarmou, and L. Michel. Random walk on surfaces with hyperbolic cusps. *arXiv :1005.2754*, 2010. 9, 62, 70, 101, 109, 110
- [CK01] M. Christ and A. Kiselev. Maximal functions associated to filtrations. *J. Funct. Anal.*, 179(2) :409–425, 2001. 51
- [CW88] T. Cazenave and F. B. Weissler. The Cauchy problem for the nonlinear Schrödinger equation in  $H^1$ . *Manuscripta Math.*, 61(4) :477–494, 1988. 49, 51, 52, 53, 54, 55
- [DB91] A. De Bouard. Nonlinear Schroedinger equations with magnetic fields. *Differential Integral Equations*, 4(1) :73–88, 1991. 49
- [Dia09] P. Diaconis. The Markov chain Monte Carlo revolution. *Bull. Amer. Math. Soc. (N.S.)*, 46(2) :179–205, 2009. 61, 62
- [DL09] P. Diaconis and G. Lebeau. Micro-local analysis for the Metropolis algorithm. *Math. Z.*, 262(2) :411–447, 2009. 9, 62
- [DLM08] P. Diaconis, G. Lebeau, and L. Michel. Analysis of the metropolis algorithm in a bounded domain. *preprint Univ. Nice*, 2008. 9, 62, 70, 85, 87, 94, 96, 97
- [DS99] M. Dimassi and J. Sjöstrand. *Spectral Asymptotics in the Semi-Classical Limit*. Lecture Note Series. 268. Cambridge University Press, London, 1999. 10, 103
- [DSC96] P. Diaconis and L. Saloff-Coste. Nash inequalities for finite Markov chains. *J. Theoret. Probab.*, 9(2) :459–510, 1996. 90
- [DSC98] P. Diaconis and L. Saloff-Coste. What do we know about the metropolis algorithm. *J. Comput. System Sci.*, 57(1) :20–36, 1998. 62, 86
- [EM89] M. Emery and P.A. Meyer. *Stochastic calculus in manifolds*. Universitext. Springer-Verlag, Berlin, 1989. 82
- [Fel71] William Feller. *An introduction to probability theory and its applications. Vol. I & II*. Second edition. John Wiley & Sons Inc., New York, 1971. 65
- [FR98] S. Fujiié and T. Ramond. Matrice de scattering et résonances associées à une orbite hétérocline. *Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor.*, 69(1) :31–82, 1998. 26
- [Gér90] C. Gérard. Semiclassical resolvent estimates for two and three-body Schrödinger operators. *Comm. Partial Differential Equations*, 15(8) :1161–1178, 1990. 42
- [GM88] C. Gérard and A. Martinez. Principe d’absorption limite pour des opérateurs de Schrödinger à longue portée. *C. R. Acad. Sci. Paris Sér. I Math.*, 306(3) :121–123, 1988. 42
- [GM89] C. Gérard and A. Martinez. Prolongement méromorphe de la matrice de scattering pour des problèmes à deux corps à longue portée. *Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor.*, 51(1) :81–110, 1989. 17
- [GM10] C. Guillarmou and L. Michel. Semiclassical analysis of random walk operators on euclidian space. *http ://arxiv.org/abs/1006.3065*, 2010. 9, 62, 101, 104, 107
- [Gre98] E. Grenier. Semiclassical limit of the nonlinear Schrödinger equation in small time. *Proc. Amer. Math. Soc.*, 126(2) :523–530, 1998. 57
- [GS87] C. Gérard and J. Sjöstrand. Semiclassical resonances generated by a closed trajectory of hyperbolic type. *Comm. Math. Phys.*, 108(3) :391–421, 1987. 22, 42
- [GV79] J. Ginibre and G. Velo. The classical field limit of scattering theory for nonrelativistic many-boson systems. II. *Comm. Math. Phys.*, 68(1) :45–68, 1979. 49

- [GV85] J. Ginibre and G. Velo. The global Cauchy problem for the nonlinear Schrödinger equation revisited. *Ann. Inst. H. Poincaré Anal. Non Linéaire*, 2(4) :309–327, 1985. 49
- [Hel88] B. Helffer. *Semi-classical analysis for the Schrödinger operator and applications*, volume 1336 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 1988. 103
- [Hel02] B. Helffer. *Semiclassical analysis, Witten Laplacians, and statistical mechanics*, volume 1 of *Series in Partial Differential Equations and Applications*. World Scientific Publishing Co. Inc., 2002. 69
- [HKN04] B. Helffer, M. Klein, and F. Nier. Quantitative analysis of metastability in reversible diffusion processes via a Witten complex approach. *Mat. Contemp.*, 26 :41–85, 2004. 69
- [HN06] B. Helffer and F. Nier. Quantitative analysis of metastability in reversible diffusion processes via a Witten complex approach : the case with boundary. *Mém. Soc. Math. Fr. (N.S.)*, (105), 2006. 69
- [HS86] B. Helffer and J. Sjöstrand. Résonances en limite semi-classique. *Mém. Soc. Math. France (N.S.)*, (24-25), 1986. 17
- [Hsu03] E. Hsu. *Stochastic analysis on manifolds*. Graduate Studies in Mathematics. Amer. Math. Soc, Providence, 2003. 82
- [IK85] H. Isozaki and H. Kitada. Scattering matrices for two-body schrödinger operators. *Sci. Papers College Arts Sci. Univ Tokyo*, 35(1) :81–107, 1985. 31
- [Kah] M. Kahle. An application of disc packing to statistical mechanics. *arXiv :0908.1830*. 97
- [KKM95] V. Kostrykin, A. Kvitsinsky, and S. Merkuriev. Potential scattering in constant magnetic field : spectral asymptotics and Levinson formula. *J. Phys. A*, 28(12) :3493–3509, 1995. 29
- [Kna99] A. Knauf. Qualitative aspects of classical potential scattering. *Regul. Chaotic Dyn.*, 4(1) :3–22, 1999. 37
- [KS88] I. Karatzas and S.E. Shreve. *Brownian Motion and Stochastic Calculus*. Graduate texts in Mathematics. Springer-Verlag, 1988. 82
- [LB99] A. Lahmar-Benbernou. Estimation des résidus de la matrice de diffusion associés à des résonances de forme. I. *Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor.*, 71(3) :303–338, 1999. 17
- [LBM99] A. Lahmar-Benbernou and A. Martinez. Semiclassical asymptotics of the residues of the scattering matrix for shape resonances. *Asymptot. Anal.*, 20(1) :13–38, 1999. 17, 36
- [LD07] G. Lebeau and P. Diaconis. Métropolis : le jour où l'étoile probabilité entra dans le champ gravitationnel de la galaxie microlocale. In *Séminaire : Équations aux Dérivées Partielles. 2006–2007*, pages Exp. No. XIV, 13. 2007. 62
- [Leb] G. Lebeau. Introduction à l'analyse de l'algorithme de metropolis. Cours de l'école d'été du GDR MOAD. <http://moad.univ-lyon1.fr/Main.php>. 62, 92
- [LM10] G. Lebeau and L. Michel. Semiclassical analysis of a random walk on a manifold. *Annals of Probability*, 38 :277–315, 2010. 9, 62, 73, 76, 80, 81, 82, 84, 104, 108
- [LPa] D. Le Peutrec. Local wkb constructions for witten laplacians on manifolds with boundary. *Analysis and PDE*, à paraître. 69

- [LPb] D. Le Peutrec. Small eigenvalues of the Neumann realization of the semiclassical Witten Laplacian. *Annales de la faculté des sciences de Toulouse*, à paraître. 69
- [Mar02] A. Martinez. Resonance free domains for non-analytic potentials. *Ann. H. Poinc.*, 4(3) :739–756, 2002. 20
- [Mic] L. Michel. On the global Cauchy problem for non-linear Schrödinger equation with magnetic fields. *unpublished*. 50
- [Mic02] L. Michel. Semi-classical limit of the scattering amplitude for trapping perturbations. *Asymptot. Anal.*, 32(3-4) :221–255, 2002. 38
- [Mic03] L. Michel. Semi-classical estimate of the residues of the scattering amplitude for long-range potentials. *J. Phys. A*, 36(15) :4375–4393, 2003. 15, 17
- [Mic05a] L. Michel. Scattering amplitude and scattering phase for the Schrödinger equation with strong magnetic field. *J. Math. Phys.*, 46(4) :043514, 18, 2005. 9, 27, 28, 29, 36
- [Mic05b] L. Michel. Scattering amplitude for the Schrödinger equation with strong magnetic field. In *Journées “Équations aux Dérivées Partielles”*, pages Exp. No. VIII, 17. École Polytech., Palaiseau, 2005. 27, 35
- [Mic05c] L. Michel. Scattering amplitude for the Schrödinger equation with strong magnetic field and strong electric potential. *Int. Math. Res. Not.*, (49) :3005–3053, 2005. 9, 27, 41
- [Mic08] L. Michel. Remarks on non-linear Schrödinger equation with magnetic fields. *Comm. Partial. Diff. Eq.*, 33 :1198–1215, 2008. 9, 47, 48, 57
- [Mou81] E. Mourre. Absence of singular continuous spectrum for certain selfadjoint operators. *Comm. Math. Phys.*, 78(3) :391–408, 1980/81. 42
- [MRR<sup>+</sup>53] N. Metropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller, and E. Teller. Equations of state calculations by fast computing machines. *J. Chem. Phys.*, 21 :1087–1092, 1953. 62, 66, 96
- [Mül92] W. Müller. Spectral geometry and scattering theory for certain complete surfaces of finite volume. *Invent. Math.*, 109(2) :265–305, 1992. 120
- [Nic97] François Nicoleau. A stationary approach to inverse scattering for Schrödinger operators with first order perturbation. *Comm. Partial Differential Equations*, 22(3-4) :527–553, 1997. 29
- [NS05] Y. Nakamura and A. Shimomura. Local well-posedness and smoothing effects of strong solutions for nonlinear Schrödinger equations with potentials and magnetic fields. *Hokkaido Math. J.*, 34(1) :37–63, 2005. 49
- [NZ09] Stéphane Nonnenmacher and Maciej Zworski. Quantum decay rates in chaotic scattering. *Acta Math.*, 203(2) :149–233, 2009. 20
- [Par67] K. R. Parthasarathy. *Probability measures on metric spaces*. Probability and Mathematical Statistics, No. 3. Academic Press Inc., New York, 1967. 82
- [Paz83] A. Pazy. *Semigroups of linear operators and applications to partial differential equations*, volume 44 of *Applied Mathematical Sciences*. Springer-Verlag, New York, 1983. 48
- [PZ01] V. Petkov and M. Zworski. Semi-classical estimates on the scattering determinant. *Ann. Henri Poincaré*, 2(4) :675–711, 2001. 18
- [Ram96] T. Ramond. Semiclassical study of quantum scattering on the line. *Comm. Math. Phys.*, 177(1) :221–254, 1996. 38

- [RD01] G. D. Raikov and M. Dimassi. Spectral asymptotics for quantum Hamiltonians in strong magnetic fields. *Cubo Mat. Educ.*, 3(2) :317–391, 2001. 28
- [RS78] M. Reed and B. Simon. *Methods of modern mathematical physics. IV. Analysis of operators*. 1978. 16, 29, 93
- [RT89] D. Robert and H. Tamura. Asymptotic behavior of scattering amplitudes in semi-classical and low energy limits. *Ann. Inst. Fourier (Grenoble)*, 39(1) :155–192, 1989. 16, 36, 39, 45
- [SC97] L. Saloff-Coste. Lectures on finite markov chains. *Lectures notes in math.* 1665. Springer, New York, 1997. 62, 90
- [Sjö97] J. Sjöstrand. A trace formula and review of some estimates for resonances. In *Microlocal analysis and spectral theory (Lucca, 1996)*, pages 377–437. Kluwer Acad. Publ., Dordrecht, 1997. 27
- [Ste01] P. Stefanov. Resonance expansions and Rayleigh waves. *Math. Res. Lett.*, 8(1-2) :107–124, 2001. 25
- [Ste02] P. Stefanov. Estimates on the residue of the scattering amplitude. *Asymptot. Anal.*, 32(3-4) :317–333, 2002. 17, 20
- [Ste03] Plamen Stefanov. Sharp upper bounds on the number of resonances near the real axis for trapping systems. *Amer. J. Math.*, 125(1) :183–224, 2003. 26
- [SZ91] J. Sjöstrand and M. Zworski. Complex scaling and the distribution of scattering poles. *J. Amer. Math. Soc.*, 4(4) :729–769, 1991. 18, 19
- [TZ98] S-H. Tang and M. Zworski. From quasimodes to resonances. *Math. Res. Lett.*, 5(3) :261–272, 1998. 25, 26, 27
- [TZ00] S-H. Tang and M. Zworski. Resonance expansions of scattered waves. *Comm. Pure Appl. Math.*, 53(10) :1305–1334, 2000. 25, 26
- [Uhl68] G. E. Uhlenbeck. An outline of statistical mechanics. In *Fundamental Problems in Statistical Mechanics*, volume 2, pages 1–19. North-Holland Publishing Co., Amsterdam, 1968. 62
- [Vai77] B. R. Vainberg. Quasiclassical approximation in stationary scattering problems. *Funct. Anal. Appl.*, 11(4) :247, 257, 1977. 36, 39
- [Yaj91] K. Yajima. Schrödinger evolution equations with magnetic fields. *J. Analyse Math.*, 56 :29–76, 1991. 48, 50, 51







