Opérateurs pseudodifférentiels semi-classiques

Clotilde Fermanian Kammerer

28 et 29 avril, X-UPS

Résumé :
Dans un premier temps, nous donnerons la définition et les premières propriétés des opérateurs pseudodifférentiels sur $\mathbb{R}^d$. En particulier, nous nous attacherons à étudier l'action de ces opérateurs sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ et décririons quelques résultats de calcul symbolique pseudodifférentiel (formules de composition, inégalité de Garding, calcul fonctionnel, théoème d'Egorov). Dans un deuxième temps, nous nous concentrerons sur les propriétés des opérateurs pseudodifférentiels liées à des aspects géométriques. Cette analyse nous permettra d'étudier la structure géométrique de l'espace des phases et ouvrira la voie à la généralisation du calcul pseudodifférentiel sur des variétés. Une attention toute particulière sera accordée au cas du tore.

1 Introduction

Nous avons vu dans l'exposé précédent que la mécanique quantique est basée sur la notion de probabilité de présence et de fonction d'onde. La fonction d'onde elle-même n'a pas d'interprétation physique : dans un espace de configuration M, c'est une fonction $\psi^\hbar$ de $L^2(M)$ de norme 1. Ici, M sera majoritairement l'espace euclidien de dimension d, $\mathbb{R}^d$; mais nous considérerons aussi le cas du tore de dimension d, $\mathbb{T}^d$ ou bien le cas d'une sous-variété de $\mathbb{R}^d$. La densité

$$n^\hbar(t,x)dx = |\psi^\hbar(t,x)|^2 dx$$

est donc une densité de probabilité et c'est $n^\hbar$ qui permet de calculer les probabilités de la mécanique quantique. Si A est une partie mesurable de M, la quantité $P(A) = \int_A n^\hbar(t,x)dx$ donne la probabilité de trouver au temps t la particule quantique dans une configuration décrite par un point de la partie A.

Les espaces fonctionnels de la mécanique quantique sont donc construits sur les espaces de Lebesque L^2 des fonctions mesurables sur M et de carré intégrable. Cet espace muni de la norme

$$\|f\|_{L^2} = \left(\int |f(x)|^2 dx\right)^{1/p}$$

est un espace de Hilbert dont le produit scalaire s'écrit

$$< f, g >= \int \overline{f}(x)g(x)dx.$$

Rappelons en particulier l'inégalité de Cauchy-Schwartz dont nous ferons usage :

$$\forall f, g \in L^2, \quad |< f, g >| \leq \|f\|_{L^2} \|g\|_{L^2}.$$

Dans le cas où $M = \mathbb{R}^d$, la transformée de Fourier est une bijection de $L^2(\mathbb{R}^d)$ dans lui même, donnée par la formule

$$\forall f \in L^2(\mathbb{R}^d), \quad \widehat{f}(\xi) = \int \mathrm{e}^{-ix\cdot\xi} f(x) dx.$$

Nous noterons aussi

$$\widehat{f}(\xi) = \mathcal{F}(f)(\xi),$$

ce qui permet de noter $\mathcal{F}^{-1}$ la transformée de Fourier inverse

$$\mathcal{F}^{-1}(g)(x) = (2\pi)^{-d} \int \mathrm{e}^{ix\cdot\xi} g(\xi) d\xi.$$

La formule d'inversion s'écrit alors

$$\forall f \in L^2(\mathbb{R}^d), \quad f(x) = \int \mathrm{e}^{ix\cdot\xi} \widehat{f}(\xi) d\xi.$$

Par ailleurs, le théorème de Plancherel s'écrit

$$\|f\|_{L^2} = (2\pi)^d \int |\widehat{f}(\xi)|^2 d\xi.$$

Notons aussi le lien entre la dérivation et la transformation de Fourier : si f est C^∞ et à support compact, ce que nous noterons $f \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, alors les

La variable de Fourier ξ s'interprète comme la variable d'impulsion et la $\hbar$-transformée de Fourier de la fonction d'onde

$$\mathcal{F}_\hbar(f)(\xi) = \frac{1}{\hbar^{d/2}} \widehat{\psi^\hbar} \left(t, \frac{\xi}{\hbar} \right)$$

permet de calculer des probabilités en impulsion. Il est donc naturel d'introduire la densité en impulsion

$$\widetilde{n^\hbar}(t, \xi) d\xi = (2\pi\hbar)^{-d} \left| \widehat{\psi^\hbar}(t, \xi/h) \right|^2 d\xi.$$

L'espace naturel de la mécanique quantique est donc l'espace des phases, l'espace des positions–impulsions (x, ξ). Nous avons déjà vu dans l'exposé précédent, et nous reverrons plus loin, comment cet espace s'interprète comme l'espace cotangent à $\mathbb{R}^d$ et comment on peut généraliser ces notions dans le cas d'une variété M.

Nous avons aussi vu que, sur $\mathbb{R}^d$, l'espace des observables de la mécanique quantique contient les fonctions $C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ que l'on teste contre la densité en position $n^\hbar(t, x)$ ou bien contre la densité en impulsion $\widetilde{n^\hbar}(t, \xi)$. On peut représenter ces deux tests comme l'action d'un opérateur sur la fonction d'onde :

$$\int \varphi(x) n^\hbar(t, x) dx = \langle \psi^\hbar, \varphi(x) \psi^\hbar \rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)},$$

$$\int \varphi(\xi)\widetilde{n^\hbar}(t,\xi)d\xi = \langle \psi^\hbar, \varphi(\hbar D)\psi^\hbar\rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)},$$

où l'opérateur $\varphi(x)$ est l'opérateur de multiplication par $\varphi(x)$ et l'opérateur $\varphi(\hbar D)$ est le multiplicateur de Fourier défini sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ par

$$\varphi(\hbar D)f(x) = (2\pi)^{-d}\int \mathrm{e}^{ix\cdot\xi}\varphi(h\xi)\widehat{\psi^\hbar}(t,\xi)d\xi.$$

Cet opérateur tire son nom de la propriété suivante

$$\forall f \in L^2(\mathbb{R}^d),\ \ \mathcal{F}\left(\varphi(\hbar D)f\right)(\xi) = \varphi(\hbar\xi)\mathcal{F}(f)(\xi),$$

que l'on peut aussi écrire

$$\forall f \in L^2(\mathbb{R}^d),\ \ \mathcal{F}_h\left(\varphi(\hbar D)f\right)(\xi) = \varphi(\xi)\mathcal{F}_h(f)(\xi).$$

L'idée des opérateurs pseudo-différentiels est de concilier le point de vue position et impulsion en permettant de considérer des observables qui soient des fonctions des deux variables x et ξ. Il s'agit donc de construire une algèbre d'opérateurs contenant les opérateurs de multiplication en variable de position ainsi que les multiplicateurs de Fourier. On va alors remplacer les densités $n^\hbar(t,x)$ et $\widetilde{n^\hbar}(t,\xi)$ par une densité généralisée $w^\hbar(t,x,\xi)$ dont les densités $n^\hbar(t,x)$ et $\widetilde{n^\hbar}(t,\xi)$ seront les marginales en ξ et en x respectivement, c'est à dire qu'on les retrouvera en projetant $w^\hbar(t,x,\xi)$ sur l'espace des x ou l'espace des ξ respectivement. Plus précisément, pour toute fonction $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, on aura

$$\int_{\mathbb{R}^d} \varphi(x)n^\hbar(t,x)dx = \int_{\mathbb{R}^{2d}} \varphi(x)w^\hbar(t,x,\xi)dx\,d\xi,$$
$$\int_{\mathbb{R}^d} \varphi(\xi)\widetilde{n^\hbar}(t,\xi)d\xi = \int_{\mathbb{R}^{2d}} \varphi(\xi)w^\hbar(t,x,\xi)dx\,d\xi.$$

Cette idée remonte à Wigner dans les années 30 ([22]) et a été amplement utilisée jusqu'à nos jours, elle permet de profiter d'un cadre de travail très confortable même si cela se fait au prix d'une légère perte : la fonction $w^\hbar(t)$ n'est plus une densité, ce n'est pas une fonction positive sur $\mathbb{R}^{2d}$. Mais cette fonction est dans $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ et son action contre des observables $a(x,\xi) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ prend son sens le plus achevé dans le cadre de la théorie des distributions de Laurent Schwartz. Nous sommes donc au bon endroit pour en parler ! L'opérateur pseudodifférentiel de symbole a sera alors l'opérateur que nous noterons $\mathrm{op}_\hbar(a)$ permettant de transcrire l'action de $w^\hbar$ sur une fonction test a en terme d'action d'un opérateur sur la fonction d'onde $\psi^\hbar$

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x,\xi)w^\hbar(t,x,\xi)dx\,d\xi = \langle \psi^\hbar(t)\ ,\ \mathrm{op}_\hbar(a)\psi^\hbar(t)\rangle_{L^2(\mathbb{R}^d)}.$$

Une dernière remarque avant d'aborder des aspects historiques, la positivité “perdue” de la transformée de Wigner se retrouve en passant à la limite $\hbar \to 0$; on peut alors montrer que toute limite faible (au sens des distributions) de $w^\hbar$ est une mesure positive. C'est la théorie des mesures semi-classiques ou mesures de Wigner que nous ne déveloperons pas ici mais qui s'est avéré être un outil précieux. Par exemple, leur utilisation a permis de démontrer de jolis résulats sur les fonctions propres du laplacien sur une sous-variété (cf. [8] et [2] par exemple) ainsi que dans d'autres domaines.

Les opérateurs pseudodifférentiels semi-classiques sont les outils de base de l'analyse semi-classique dont le développement est intimement lié à celui de l'analyse microlocale. On peut voir l'analyse semi-classique comme étant issue de l'intérêt d'une communauté imbibée de techniques microlocales vers des questions de physique théorique. L'analyse microlocale (qui utilise le calcul pseudodifférentiel général c'est à dire sans petit paramètre) s'est développée dans les années 1970, en particulier autour du séminaire Goulaouic-Schwartz qui avait lieu dans les murs de cette école. Les débuts de l'analyse semi-classique peuvent être situés autour de 1977, date de la thèse d'Andros (cf. [21]) que cite Bernard Helffer dans sa "bibliographie commentée" (cf. [10]). En effet, on y voit apparaître une utilisation du calcul de Weyl déjà introduit par Shubin ([20]) et qui sera systématiquement étudié par Hörmander ([12]). Nous présentons ici une version relativement simple des opérateurs pseudodifférentiels semi-classiques puisque nous considérerons des symboles à support compact. De façon plus générale, la théorie complète des opérateurs pseudodifférentiel permet de considérer des classes de symbole plus générales. Nous renvoyons aux nombreux ouvrages existant sur le sujet où les différents points de vue que l'on peut adopter sont décrits en détail ; nous recommandons en particulier les livres [1, 5, 16, 23]. Il faut noter que des classes d'opérateurs pseudodifférentiels peuvent aussi être définies sur des groupes qui ne sont pas commutatifs (à la différence de l'espace euclidien ou du tore), que ce soit sur des groupes de Lie compacts (cf. [19]) ou des groupes de Lie non compacts comme dans l'article [3] pour le groupe de Heisenberg et le livre récent [7] pour le cas général des groupes de Lie stratifiés. Cette théorie est donc encore en plein essor.

2 Opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques

2.1 Définition sur $\mathbb{R}^d$

Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ et $\hbar \in]0,1]$ un petit paramètre. On définit l'opérateur pseudodifférentiel semi-classique de symbole a par

$$\forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d),\ \ \mathrm{op}_\hbar(a)f(x) = (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}f(y)dy\,d\xi. \quad (1)$$

Comme on l'a fait remarquer précédemment, si $a = a(x)$, $\mathrm{op}_\hbar(a)$ est l'opérateur de multiplication par $a(x)$. Et si $a = a(\xi)$, alors $\mathrm{op}_\hbar(a)$ est le multiplicateur de Fourier $a(hD)$.

Transformée de Wigner. Soit $(\psi^\hbar)_{\hbar>0}$ une famille bornée de $L^2(\mathbb{R}^d)$, la transformée de Wigner de $(\psi^\hbar)_{\hbar>0}$ est la fonction de $L^2(\mathbb{R}^{2d})$

$$w^\hbar(x,\xi) = (2\pi)^{-d}\int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{e}^{iv\cdot\xi}\psi^\hbar\left(x+\hbar\frac{v}{2}\right)\overline{\psi}^\hbar\left(x-\hbar\frac{v}{2}\right)dv.$$

On a alors

$$\forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}),\ \ \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x,\xi)w^\hbar(x,\xi)dx\,d\xi = \left(\mathrm{op}_\hbar(a)\psi^\hbar,\psi^\hbar\right)_{L^2(\mathbb{R}^d)}.$$

Action sur la classe de Schwartz. On note $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ l'ensemble des fonctions C^∞ à décroissace rapide ainsi que toutes leurs dérivées. Elles vérifient

$$\forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d),\ \ \forall \alpha,\beta \in \mathbb{N}^d,\ \ \exists C_{\alpha,\beta} > 0,\ \ \sup_{x\in\mathbb{R}^d} \left| x^\alpha \partial_x^\beta f(x)\right| \leq C_{\alpha,\beta}.$$

Proposition 1. *L'opérateur* $\mathrm{op}_\hbar(a)$ *envoie* $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ *sur lui-même.*

Preuve: Il faut d'abord remarquer que si $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, l'intégrale est convergente à cause de la décroissance rapide de f et parce que a est à support compact. Le fait que $\mathrm{op}_\hbar(a)f$ est dans $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ vient ensuite de deux observations qui sont à la base de l'analyse des opérateurs pseudo-différentiels. Il s'agit de deux intégrations par parties extrêmement simples. Pour $j \in \{1,\cdots,d\}$, on remarque tout d'abord que l'on a

$$\begin{aligned} x_j \mathrm{op}_\hbar(a) f(x) &= (2\pi\hbar)^{-d}\frac{\hbar}{i}\int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right)\partial_{\xi_j}\left(\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}\right) f(y)dy\,d\xi \\ &\quad +(2\pi\hbar)^{-d}\frac{\hbar}{i}\int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} y_j f(y)dy\,d\xi \\ &= i\hbar(2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} \partial_{\xi_j} a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} f(y)dy\,d\xi \\ &\quad -i\hbar\,(2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} y_j f(y)dy\,d\xi \end{aligned}$$

et ces intégrales sont bien définies puisque $\partial_{\xi_j} a$ est à support compact et $x_j f(x)$ à décroissance rapide. Par ailleurs

$$\begin{aligned} \partial_{x_j}\left[(\mathrm{op}_\hbar(a)f)\right](x) &= \frac{1}{2}(2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} \partial_{x_j} a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} f(y)dy \\ &\quad -(2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right)\partial_{y_j}\left(\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}\right) f(y)dy\,d\xi \\ &= (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} \partial_{x_j} a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} f(y)dy\,d\xi \\ &\quad +(2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{x+y}{2},\xi\right)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} \partial_{x_j} f(y)dy\,d\xi, \end{aligned}$$

et on conclut de façon similaire.

Autres choix de quantification. On appelle **quantification de Weyl**, cette manière d'associer à la fonction a un opérateur $\mathrm{op}_\hbar(a)$. D'autres choix de quantification sont possibles et utilisés : on parle de la **quantification classique** ou **quantification gauche** avec l'opéateur $a(x,\hbar D)$ défini par

$$\forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d),\ \ a(x,\hbar D)f(x) = (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(x,\xi\right)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} f(y)dy\,d\xi.$$

Ces choix sont des cas particuliers de la ***t*-quantification** (cf. [23] par exemple) :

$$\forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d),\ \ \mathrm{op}_\hbar^t(a)f(x) = (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(tx+(1-t)y,\xi\right)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} f(y)dy\,d\xi.$$

Le choix de $t=1/2$ correspond à la quantification de Weyl tandis que le choix $t=1$ donne la quantification classique. On peut montrer (et on le verra dans le paragraphe suivant) que les opérateurs associés au même symbole a par ces différentes quantifications diffèrent d'un $O(\hbar)$, en tant qu'opérateurs agissant sur $L^2(\mathbb{R}^d)$. L'avantage de la quantification de Weyl réside dans le fait que l'opérateur ainsi défini est auto-adjoint dès que a est à valeurs réelles, comme nous le verrons dans la suite.

Remarque. Nous terminons par une remarque mettant en lumière le lien entre la définition que nous avons donnée ici et celle de l'exposé précédent. Soit $\widetilde{a}$ la fonction définie via la transformations de Fourier telle que

$$a(x,\xi) = (2\pi)^{-d} \int \widetilde{a}(\omega_x, \omega_\xi) \mathrm{e}^{i(\omega_x \cdot x + \omega_\xi \cdot \xi)} d\omega_x d\omega_\xi,$$

(cf. l'exposé de Frédéric Faure), nous obtenons

$$\begin{aligned}
\mathrm{op}_\hbar(a)f(y) &= (2\pi)^{-d} \int_{(\omega_x,\omega_\xi)\in\mathbb{R}^{2d}} \widetilde{a}(\omega_x, \omega_\xi) \mathrm{e}^{i\omega_x \cdot x} \\
&\quad \times \left[(2\pi\hbar)^{-d} \int_{(y,\xi)\in\mathbb{R}^{2d}} e^{i\omega_\xi \cdot \xi} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} f(y) dy d\xi \right] d\omega_x d\omega_\xi \\
&= (2\pi)^{-d} \int_{(\omega_x,\omega_\xi)\in\mathbb{R}^{2d}} \widetilde{a}(\omega_x, \omega_\xi) \mathrm{e}^{i\omega_x \cdot x} \mathrm{e}^{i\omega_\xi \cdot (\hbar D)} f(x) d\omega_x d\omega_\xi,
\end{aligned}$$

d'où la formule

$$\mathrm{op}_\hbar(a) = (2\pi)^{-d} \int \widetilde{a}(\omega_x, \omega_\xi) \mathrm{e}^{i(\omega_x \cdot x + \omega_\xi \cdot (\hbar D))} d\omega_x d\omega_\xi.$$

2.2 Action sur $L^2(\mathbb{R}^d)$

L'analyse de l'action des opérateurs pseudodifférentiels sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ se fait aisément une fois que l'on a remarqué que $\mathrm{op}_\hbar(a)$ est un opérateur à noyau. Plus précisément, le noyau de $\mathrm{op}_\hbar(a)$ est la fonction

$$k_\hbar(x,y) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} a\left(\frac{x+y}{2}, \xi\right) d\xi.$$

Pour estimer la norme d'un opérateur à noyau sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, nous allons utiliser le lemme de Schur.

Lemme 1. *Soit K un opérateur sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ de noyau $k(x,y)$:*

$$Kf(x) = \int_{\mathbb{R}^d} k(x,y) f(y) dy.$$

S'il existe $C > 0$ tel que

$$\int \sup_{y\in\mathbb{R}^d} |k(x,y)|\, dx \leq C \quad \text{et} \quad \int \sup_{x\in\mathbb{R}^d} |k(x,y)|\, dy \leq C,$$

alors K est un opérateur borné de $L^2(\mathbb{R}^d)$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ et

$$\|K\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq C.$$

Preuve: Soit $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$, on écrit

$$\begin{aligned}\|Kf\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)} &= \int |Kf(x)|^2\, dx \\ &= \int k(x,y)\overline{k(x,z)}f(y)\overline{f(z)}dxdydz.\end{aligned}$$

En utilisant

$$\left|f(y)\overline{f(z)}\right| \leq \frac{1}{2}\left(|f(y)|^2 + |f(z)|^2\right),$$

on obtient

$$\begin{aligned}\|Kf\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)} &\leq \frac{1}{2}\int\left(\int |k(x,y)||f(y)|^2dy\right)\left(\int |k(x,z)|dz\right)dx \\ &\quad +\frac{1}{2}\int\left(\int |k(x,z)||f(z)|^2dz\right)\left(\int |k(x,y)|dy\right)dx \\ &\leq C^2\,\|f\|^2.\end{aligned}$$

Une conséquence du lemme de Schur est le corollaire suivant

Corollaire 1. *Soit $P_\hbar$ un opérateur de noyau $k(x,y)$ de la forme*

$$k(x,y) = \hbar^{-d}K\left(\frac{x+y}{2}, \frac{x-y}{\hbar}\right)$$

et tel que la fonction K vérifie

$$N(K) := \int \sup_{X\in\mathbb{R}^d} |K(X,v|dv < +\infty.$$

Alors l'opérateur $P_\hbar$ est un opérateur borné sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ et

$$\|P_\hbar\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq N(K).$$

Preuve: Il suffit décrire

$$\begin{aligned}\int_{\mathbb{R}^d}\sup_{y\in\mathbb{R}^d}|k(x,y)|dx &= \int_{\mathbb{R}^d}\sup_{y\in\mathbb{R}^d}\left|K\left(y+\frac{h}{2}v,v\right)\right|dv \leq \int\sup_{X\in\mathbb{R}^d}|K(X,v)|\,dv, \\ \int_{\mathbb{R}^d}\sup_{x\in\mathbb{R}^d}|k(x,y)|dy &= \int_{\mathbb{R}^d}\sup_{x\in\mathbb{R}^d}\left|K\left(x-\frac{h}{2}v,v\right)\right|dv \leq \int\sup_{X\in\mathbb{R}^d}|K(X,v)|\,dv.\end{aligned}$$

Nous pouvons maintenant étudier l'opérance sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ des opérateurs pseudodifférentiels. En effet, le noyau de $\mathrm{op}_\hbar(a)$ vérifie

$$k_\hbar(x,y) = \hbar^{-d}K_a\left(\frac{x+y}{2}, \frac{x-y}{\hbar}\right)$$

avec

$$K_a(X,v) = \mathcal{F}_\xi^{-1}a\,(X,v)\,.$$

Comme a est à support compact en ξ, la fonction $v \mapsto \mathcal{F}_\xi^{-1}a\,(X,v)$ est intégrable et le corollaire ci-dessus implique le résultat suivant.

Théorème 1. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, alors la famille d'opérateurs $(\mathrm{op}_\hbar(a))_{\hbar>0}$ est bornée dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ et*

$$\|\mathrm{op}_\hbar(a)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq C(a) := \int \sup_{X\in\mathbb{R}^d} \left|\mathcal{F}_\xi^{-1} a\,(X,v)\right| dv.$$

Si l'on veut estimer la constante $C(a)$ en fonction de normes sup de dérivées de a, on peut remarquer que pour $|v| \geq 1$ et $\alpha \in \mathbb{N}^d$,

$$v^\alpha \mathcal{F}_\xi^{-1} a\,(X,v) = \mathcal{F}_\xi^{-1}((-D_\xi)^\alpha a)\,(X,v)\,.$$

Par conséquent, nous avons le corollaire suivant

Corollaire 2. *Il existe une constante $c > 0$ telle que*

$$\forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}),\ \ C(a) \leq c \sup_{\beta\in\mathbb{N}^d,\ |\beta|\leq d+1} \left\| \sup_{x\in\mathbb{R}^d} |\partial_\xi^\beta a(x,\cdot)| \right\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}. \tag{2}$$

Ce résultat permet donc de définir des opérateurs pseudodifférentiels pour des symboles comportant peu de régularité en x. Il suffit que a soit à support compact et que $\partial_\xi^\beta a$ soit bornée et localement intégrable pour tout multi-indice $\beta \in \mathbb{N}^d$ tel que $|\beta| \leq d+1$. Ici, on a choisi une estimation de la norme de $\mathrm{op}_\hbar(a)$ qui ne "consomme" que des dérivées en ξ mais en nombre conséquent. On peut trouver d'autres estimations dans la littérature, la moins coûteuse en dérivées étant due à Hwang (cf. [13] ou bien l'exercice 5.3 p.59 de [1]) pour la quantification classique : il existe $C > 0$ tel que pour tout $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$,

$$\|a(x,D)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq C \sum_{\alpha\in\{0,1\}^d,\,\beta\in\{0,1\}^d} \ \sup_{(x,\xi)\in\mathbb{R}^{2d}} \left|\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta a(x,\xi)\right|.$$

2.3 Le noyau d'un opérateur pseudodifférentiel

Nous avons déjà vu que si $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, l'opérataur $\mathrm{op}_\hbar(a)$ est un opérateur de noyau

$$k_\hbar(x,y) = \hbar^{-d} \mathcal{F}_\xi^{-1} a \left(\frac{x+y}{2}, \frac{x-y}{\hbar}\right).$$

On peut donc retrouver le symbole à partir du noyau grâce à la formule

$$a(x,\xi) = \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\xi\cdot v} k_\hbar\left(x+\frac{v}{2}, x-\frac{v}{2}\right) dv = \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{e}^{-i\xi\cdot v} K_a(x,v) dv. \tag{3}$$

On remarque aussi que l'opérateur $\mathrm{op}_\hbar(a)$ est un opérateur à trace et que

$$\mathrm{Tr}\,(\mathrm{op}_\hbar(a)) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x,\xi) dx\, d\xi.$$

De plus, $\mathrm{op}_\hbar(a)$ est un opérateur Hilbert-Schmidt et

$$\begin{aligned} \|\mathrm{op}_\hbar(a)\|_{\mathrm{HS}(L^2(\mathbb{R}^d)} &= \int |k_\hbar(x,y)|^2 \, dx\, dy \\ &= (2\pi\hbar)^{-d/2} \|a\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} \end{aligned}$$

Notons que la trace de $\mathrm{op}_\hbar(a)$ ainsi que sa norme Hilbert-Schmidt sont des fonction non bornées de h.

On va finir cette partie par une remarque concernant le noyau d'un opérateur pseudodifférentiel semi-classique. Il s'agit de mettre en lumière que la partie la plus importante du noyau k_a d'un opérateur $\mathrm{op}_\hbar(a)$ réside sur la diagonale $x = y$. Plus précisément nous montrons la proposition suivante.

Proposition 2. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ telle que $\chi(0) = 1$, $\delta > 0$ et $K_{\delta,h}$ l'opérateur de noyau*

$$k_{\delta,h}(x, y) = k_a(x, y)\chi\left(\frac{x - y}{\delta}\right).$$

Alors dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$, on a

$$\mathrm{op}_\hbar(a) = K_{\delta,\hbar} + O(h/\delta).$$

Preuve: Nous écrivons

$$\mathrm{op}_\hbar(a) = K_{\delta,\hbar} + R_\hbar$$

où $R_\hbar$ est l'opérateur de noyau $\hbar^{-d} r_h\left(\frac{x + y}{2}, \frac{x - y}{\hbar}\right)$ avec

$$r_h(X, v) = K_a(X, v)\left(1 - \chi\left(\frac{hv}{\delta}\right)\right).$$

On remarque alors que la fonction $u \mapsto 1 - \chi(u)$ s'annule en $u = 0$ et peut donc s'écrire

$$1 - \chi(u) = u \cdot \theta(u)$$

avec $\theta \in C^\infty(\mathbb{R}^d)$, θ bornée ainsi que toutes ses dérivées. On peut donc écrire

$$\begin{aligned} r_h(X, v) &= \frac{h}{\delta} K_a(X, v) v \cdot \theta\left(\frac{hv}{\delta}\right) \\ &= \frac{h}{\delta} \mathcal{F}_\xi^{-1}(i\nabla_\xi a)(X, v) \cdot \theta\left(\frac{hv}{\delta}\right), \end{aligned}$$

de sorte que

$$\int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X \in \mathbb{R}^d} |r_h(X, v)| dv \leq \frac{h}{\delta} \|\theta\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \int \sup_{x \in \mathbb{R}^d} |\mathcal{F}_\xi^{-1}(\partial_\xi a)(x, v)| dv.$$

On en déduit que

$$\|R_\hbar\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} = O\left(\frac{h}{\delta}\right).$$

2.4 Comparaison des différentes quantifications

Nous allons comparer les différentes quantifications en analysant les noyaux de ces opérateurs. Il suffit de comparer la quantification de Weyl et la t-quantification pour n'importe quel $t \in (0, 1)$.

Proposition 3. *Soit $t \in (0,1)$ et $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, alors, dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$,*

$$\mathrm{op}_\hbar(a) = \mathrm{op}_\hbar^t(a) + O(\hbar).$$

Preuve: On part du fait que le noyau de $\mathrm{op}_\hbar^t(a)$ est la fonction

$$\tilde{k}_{a,t}(x,y) = \hbar^{-d} K_{a,t}\left(\frac{x+y}{2}, \frac{x-y}{\hbar}\right)$$

avec

$$K_{a,t}(X,v) = \mathcal{F}_\xi^{-1} a\left(X + \hbar\left(t - \frac{1}{2}\right)v, v\right).$$

Une formule de Taylor permet d'écrire

$$K_{a,t}(X,v) = K_a(X,v) + \hbar\left(t - \frac{1}{2}\right) B_\hbar(X,v),$$

où

$$B_\hbar(X,v) = v \cdot \int_0^1 \mathcal{F}_\xi^{-1} \nabla_x a\left(X + hs\left(t - \frac{1}{2}\right)v, v\right) ds.$$

On a donc

$$\mathrm{op}_\hbar^t(a) = \mathrm{op}_\hbar(a) + \hbar\left(t - \frac{1}{2}\right) R_\hbar,$$

où $R_\hbar$ est l'opérateur de noyau

$$r_\hbar(x,y) = \hbar^{-d} B_\hbar\left(\frac{x+y}{2}, \frac{x-y}{\hbar}\right).$$

Le fait que l'opérateur $R_\hbar$ soit un opérateur borné sur $L^2(\mathbb{R}^d)$, uniformément par rapport à $\hbar$ vient de l'estimation

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X \in \mathbb{R}^d} |B_\hbar(X,v)|\, dv &= \int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X \in \mathbb{R}^d} \left| \int_0^1 \mathcal{F}_\xi^{-1} \left(i \nabla_x \cdot \nabla_\xi a\right)\left(X + hs(t - 1/2)v, v\right) ds \right| dv \\
&\leq \int_{\mathbb{R}^d} \sup_{Y \in \mathbb{R}^d} \left| \mathcal{F}_\xi^{-1} \left(i \nabla_x \cdot \nabla_\xi a\right)(Y,v) \right| dv.
\end{aligned}$$

3 Calcul symbolique

Dans cette partie nous allons démontrer un certain nombre de formules concernant l'adjoint et la composition d'opérateurs pseudodifférentiels.

3.1 L'algèbre des opérateurs pseudodifférentiels semi-classiques

Proposition 4. *Soit $a, b \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, alors, dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$,*

$$\begin{aligned}
\mathrm{op}_\hbar(a)^* &= \mathrm{op}_\hbar(\overline{a}), \\
\mathrm{op}_\hbar(a)\mathrm{op}_\hbar(b) &= \mathrm{op}_\hbar(ab) + \frac{\hbar}{2i}\, \mathrm{op}_\hbar\left(\{a,b\}\right) + O(h^2), \\
[\mathrm{op}_\hbar(a), \mathrm{op}_\hbar(b)] &= \frac{\hbar}{i}\, \mathrm{op}_\hbar(\{a,b\}) + O(h^3),
\end{aligned}$$

où le crochet de Poisson des fonctions a et b est donné par

$$\{a,b\} = \nabla_\xi a \cdot \nabla_x b - \nabla_\xi b \cdot \nabla_x a.$$

Il est important de remarquer que les formules de composition restent valables si l'un des opérateurs est un opérateur différentiel à coefficients C^∞.

Preuve: La première relation est évidente puisque

$$\begin{aligned}\overline{k_\hbar(y,x)} &= \hbar^{-d}\overline{\mathcal{F}_\xi^{-1}a}\left(\frac{x+y}{2},-\frac{x-y}{\hbar}\right)\\ &= \hbar^{-d}\mathcal{F}_\xi^{-1}\overline{a}\left(\frac{x+y}{2},\frac{x-y}{\hbar}\right)\end{aligned}$$

où l'on a utilisé $\overline{\mathcal{F}_\xi^{-1}(f)}(v) = \mathcal{F}_\xi^{-1}(\overline{f})(-v)$. Le noyau de $\mathrm{op}_\hbar(a)^*$ est donc égal au noyau de $\mathrm{op}_\hbar(\overline{a})$, ces deux opérateurs sont donc égaux.

Etudions maintenant la formule de composition : le noyau de $\mathrm{op}_\hbar(a)\circ\mathrm{op}_\hbar(b)$ est la fonction $k_\hbar(x,y)$ donnée par

$$k_\hbar(x,y) = (2\pi\hbar)^{-2d}\int_{\mathbb{R}^{3d}} a\left(\frac{x+z}{2},\zeta\right) b\left(\frac{y+z}{2},\eta\right) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(x-z)\cdot\zeta+\frac{i}{\hbar}(z-y)\cdot\eta}d\eta\, d\zeta\, dz.$$

Ecrivons $k_\hbar(x,y) = \hbar^{-d}K_\hbar\left(\frac{x+y}{2},\frac{x-y}{\hbar}\right)$ avec

$$\begin{aligned}K_\hbar(X,v) = (2\pi)^{-2d}\int_{\mathbb{R}^{3d}} a\left(X+\frac{\hbar}{2}\left(w+\frac{v}{2}\right),\zeta\right) b\left(X+\frac{\hbar}{2}\left(w-\frac{v}{2}\right),\eta\right)\\ \times\,\mathrm{e}^{-i\zeta\cdot\left(w-\frac{v}{2}\right)+i\eta\cdot\left(w+\frac{v}{2}\right)}d\zeta\, d\eta\, dw.\end{aligned}$$

Nous allons maintenant utiliser la relation (3) pour écrire

$$\mathrm{op}_\hbar(a)\mathrm{op}_\hbar(b) = \mathrm{op}_\hbar(c_\hbar)$$

avec

$$c_\hbar(x,\xi) = \int \mathrm{e}^{-i\xi\cdot v}K_\hbar(x,v)dv.$$

Il est alors naturel de faire le nouveau changement de variable

$$u = w+\frac{v}{2},\ \ u' = w-\frac{v}{2}.$$

On obtient

$$\begin{aligned}c_\hbar(x,\xi) = (2\pi)^{-2d}\int_{\mathbb{R}^{3d}} a\left(x+\frac{\hbar}{2}u,\zeta\right) b\left(x+\frac{\hbar}{2}u',\eta\right)\\ \times\,\mathrm{e}^{i(\xi-\zeta)\cdot u'+i(\eta-\xi)\cdot u}d\zeta\, d\eta\, du\, du'.\end{aligned}$$

Les formules asymptotiques de la proposition viennent alors de l'utilisation de la formule de Taylor sur la fonction

$$(u,u') \mapsto a\left(x+\frac{\hbar}{2}u,\zeta\right) b\left(x+\frac{\hbar}{2}u',\eta\right) \tag{4}$$

et de l'observation que pour $j \in \{1,\cdots,d\}$,

$$u_j\,\mathrm{e}^{i(\eta-\xi)\cdot u} = -i\partial_{\eta_j}\left(\mathrm{e}^{i(\eta-\xi)\cdot u}\right),\ \ u'_j\mathrm{e}^{i(\xi-\zeta)\cdot u'} = i\partial_{\zeta_j}\left(\mathrm{e}^{i(\xi-\zeta)\cdot u'}\right). \tag{5}$$

Mettons-cette stratégie en oeuvre en poussant le développement de Taylor au deuxième ordre :

$$a\left(x+\frac{\hbar}{2}u,\zeta\right)b\left(x+\frac{\hbar}{2}u',\eta\right)=a(x,\zeta)b(x,\eta)+\frac{\hbar}{2}\,u\cdot\nabla_x a(x,\zeta)b(x,\eta)$$
$$+\frac{\hbar}{2}\,u'\cdot\nabla_x b(x,\eta)a(x,\zeta)+\hbar^2\,G(x,\zeta,\eta,u,u')[(u,u'),(u,u')]$$

où $G(x,\zeta,\eta,u,u')$ est une matrice de taille $(2d)\times(2d)$, de classe C^∞, à support compact en ζ et η, bornée ansi que toutes ses dérivées, uniformément par-rapport au paramètre $\hbar\in(0,h_0)$ et par-rapport aux variables u et u', et satisfait de plus, pour tout $\alpha,\gamma\in\mathbb{N}^{2d}$, à

$$\sup_{\hbar,x,\zeta,u,u'}\left|\partial_\zeta^\gamma\partial_\eta^\alpha G(x,\zeta,\eta,u,u')\right|\leq C_{\alpha,\gamma}\sup_{x,\xi}\sup_{|\beta|=2}|\partial_x^\beta\partial_\xi^\gamma a(x,\xi)|\sup_{x,\xi}\sup_{|\beta|=2}|\partial_x^\beta\partial_\xi^\alpha b(x,\xi)|$$

où $C_{\alpha,\gamma}>0$ est une constante indépendante de $\hbar$. En injectant cette formule dans l'expression de $c_\hbar(x,\xi)$, on obtient

$$c_\hbar(x,\xi)=c_0+\hbar\,c_1+\hbar^2\,r_\hbar$$

avec

$$\begin{aligned}
c_0 &= (2\pi)^{-2d}\int_{\mathbb{R}^{3d}}a\left(x,\zeta\right)b\left(x,\eta\right)\mathrm{e}^{i(\xi-\zeta)\cdot u'+i(\eta-\xi)\cdot u}d\zeta\,d\eta\,du\,du'\\
c_1 &= \frac{1}{2}(2\pi)^{-2d}\int_{\mathbb{R}^{3d}}\left(u\cdot\nabla_x a\left(x,\zeta\right)b\left(x,\eta\right)+u'\cdot\nabla_x b(x,\eta)a(x,\zeta)\right)\\
&\qquad\times\mathrm{e}^{i(\xi-\zeta)\cdot u'+i(\eta-\xi)\cdot u}d\zeta\,d\eta\,du\,du'\\
r_\hbar &= (2\pi)^{-2d}\int_{\mathbb{R}^{3d}}G(x,\zeta,\eta,u,u')[(u,u'),(u,u')]\mathrm{e}^{i(\xi-\zeta)\cdot u'+i(\eta-\xi)\cdot u}d\zeta\,d\eta\,du\,du'.
\end{aligned}$$

L'intégration en u et en u' donne des masses de Dirac $\delta(\xi-\zeta)$ et $\delta(\xi-\eta)$ qui montrent que

$$c_0=a(x,\xi)b(x,\xi).$$

Pour traiter c_1, on commence par faire des intégrations par parties en ζ et en η pour tirer profit de (5), puis on intègre en u et u' comme précédemment. On obtient

$$\begin{aligned}
c_1 &= \frac{1}{2}(2\pi)^{-2d}\int_{\mathbb{R}^{3d}}\left(i\nabla_x a\left(x,\zeta\right)\cdot\nabla_\xi b\left(x,\eta\right)-i\nabla_x b(x,\eta)\cdot\nabla_\xi a(x,\zeta)\right)\\
&\qquad\times\mathrm{e}^{i(\xi-\zeta)\cdot u'+i(\eta-\xi)\cdot u}d\zeta\,d\eta\,du\,du'\\
&= \frac{i}{2}\nabla_x a\left(x,\xi\right)\cdot\nabla_\xi b\left(x,\xi\right)-\frac{i}{2}\nabla_x b(x,\xi)\cdot\nabla_\xi a(x,\xi)
\end{aligned}$$

Enfin, il reste à montrer que $r_\hbar$ apporte une contribution bornée. Pour cela, on commence par faire des intégrations par parties en exploitant la remarque (5), ce qui amène à écrire $r_\hbar$ comme une combinaison linéaire de termes de la forme

$$r_{\beta,\gamma,\hbar}(x,\xi)\;=\;(2\pi)^{-2d}\int_{\mathbb{R}^{4d}}\partial_{\eta,\zeta}^\alpha G_{\beta,\gamma}(x,\zeta,\eta,u,u')\mathrm{e}^{i(\xi-\zeta)\cdot u'+i(\eta-\xi)\cdot u}d\zeta\,d\eta\,du\,du'$$

où les fonctions $G_{\beta,\gamma}$ sont les coefficients de la matrice G (qui est de taille $(2d)\times(2d)$) et $\alpha\in\mathbb{N}^{2d}$ vérifie $|\alpha|=2$. Nous allons montrer que l'opérateur $R_\hbar$ de noyau

$$(2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^d} r_{\beta,\gamma,\hbar}\left(\frac{x+y}{2},\xi\right)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}d\xi$$

est uniformément borné dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ avec

$$\|R_\hbar\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d)}\leq C\left(\sup_{|\alpha|\leq N_0}\int\sup_{x\in\mathbb{R}^d}|\partial_\xi^\alpha a(x,v)|dv\right)\left(\sup_{|\alpha|\leq N_0}\int\sup_{x\in\mathbb{R}^d}|\partial_\xi^\alpha b(x,v)|dv\right) \tag{6}$$

où $C>0$ est une constante indépendante de h et N_0 un entier. On va utiliser l'estimation (2) du Corollaire 2 :

$$\|R_\hbar\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))}\leq C\sup_{\alpha\in\mathbb{N}^{2d},\,|\alpha|\leq 2}\ \sup_{|\ell|\leq d+1}\int\sup_{x\in\mathbb{R}^d}|\partial_\xi^\ell r_{\beta,\gamma,\hbar}(x,v)|dv.$$

Fixons donc $\beta,\gamma\in\mathbb{N}^{2d}$ et étudions $\partial_\xi^\alpha r_{\beta,\gamma,\hbar}$. En utilisant des intégrations par parties en u et u', on remarque tout d'abord qu'il existe $C>0$ et $N_1\in\mathbb{N}$ tel que

$$\begin{aligned}|r_{\beta,\gamma,\hbar}(x,\xi)|\leq C&\left(\int_{\mathbb{R}^d}(1+|u|^2)^{-d}du\right)^2\\ &\times\sup_{\ell\in\mathbb{N}^{2d},|\ell|\leq d+1}\int_{\mathbb{R}^{2d}}\sup_{u,u'\in\mathbb{R}^d}\left|\partial_{\eta,\zeta}^\ell G_{\beta,\gamma}(x,\zeta,\eta,u,u')\right|d\zeta\,d\eta.\end{aligned}$$

Rappelons que $G_{\beta,\gamma}$ est à support compact en η et ζ et provient du reste de formules de Taylor sur a et sur b utilisées pour calculer c_h. Il existe donc $C>0$ et $N_0\in\mathbb{N}$ tels que

$$\begin{aligned}&\sup_{\ell\in\mathbb{N}^{2d},|\ell|\leq d+1}\int_{\mathbb{R}^{2d}}\sup_{u,u'\in\mathbb{R}^d}\left|\partial_{\eta,\zeta}^\ell G_{\beta,\gamma}(x,\zeta,\eta,u,u')\right|d\zeta\,d\eta\\ &\qquad\leq C\left(\sup_{|\alpha|\leq N_0}\int\sup_{x\in\mathbb{R}^d}|\partial_\xi^\alpha a(x,v)|dv\right)\left(\sup_{|\alpha|\leq N_0}\int\sup_{x\in\mathbb{R}^d}|\partial_\xi^\alpha b(x,v)|dv\right).\end{aligned}$$

ce qui conclut la preuve de (6).

La formule sur le commutateur est une conséquence de la formule précédente. Il faut juste remarquer que les termes d'ordre pair dans la formule de Taylor (4) sont symétriques en u et u'. Ils génèrent donc des contributions identiques dans le développement de $\mathrm{op}_\hbar(a)\mathrm{op}_\hbar(b)$ et dans celui de $\mathrm{op}_\hbar(b)\mathrm{op}_\hbar(a)$.

Dans la preuve ci-dessus, on voit qu'en poussant le développement de Taylor à un ordre supérieur, on obtiendrait un développement asymptotique d'ordre supérieur. On voit que l'on peut réaliser cela à l'ordre que l'on veut. On a donc des formules asymptotiques à tout ordre.

Le calcul symbolique a de nombreuses applications. Dans les deux paragraphes suivants nous en décrivons quelques-unes.

3.2 Applications

3.2.1 Inégalité de Garding

L'inégalité de Garding répond à la question du lien entre la positivité de la fonction a et la positivité de l'opérateur associée. Nous démontrons ici une version faible de l'inégalité de Garding.

Proposition 5. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ tel que $a \geq 0$. Alors, pour tout $\delta > 0$, il existe $C_\delta > 0$ tel que pour tout $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$,*

$$\langle f, \mathrm{op}_\hbar(a) f \rangle \geq (\delta - C_\delta \hbar^2) \|f\|^2, \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R}^d).$$

Remarque 1. *Sous les hypothèses de la proposition ci-dessus, on peut démontrer l'inégalité suivante :*

$$\exists C > 0, \quad \forall f \in L^2(\mathbb{R}^d), \quad \langle f, \mathrm{op}_\hbar(a) f \rangle \geq -C\hbar^2 \|f\|^2.$$

Cette inégalité est connue sous le nom d'inégalité de Fefferman-Phong. Nous nous contenterons de démontrer l'inégalité faible de la proposition qui permet déjà d'obtenir des résultats intéressants.

Preuve: La proposition repose sur l'observation que si $a \geq 0$, on peut lui associer une "presque racine carrée" en considérant une fonction $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ telle que $\chi a = 1$ et en posant pour $\tilde{\delta} > 0$

$$b_\delta(x, \xi) = \chi(x, \xi) \left(a(x, \xi) + \tilde{\delta} \right)^{1/2}.$$

On obtient ainsi une fonction $b_{\tilde{\delta}} \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ telle que

$$b_{\tilde{\delta}}(x, \xi)^2 = a(x, \xi) + \tilde{\delta}\, \chi^2(x, \xi).$$

Le calcul symbolique donne alors dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$,

$$\mathrm{op}_\hbar(b_{\tilde{\delta}})^* \mathrm{op}_\hbar(b_\delta) = \mathrm{op}_\hbar(a) + \tilde{\delta}\, \mathrm{op}_\hbar(\chi^2(x, \xi)) + O(h^2).$$

Considérons maintenant $\delta > 0$, ajustons $\tilde{\delta}$ de sorte que

$$\tilde{\delta} \|\mathrm{op}_\hbar(\chi^2(x, \xi))\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leq \delta,$$

on obtient pour $f \in L^2(\mathbb{R}^d)$,

$$\begin{aligned} 0 \leq \|\mathrm{op}_\hbar(b_{\tilde{\delta}}) f\|^2 &= \langle f, \mathrm{op}_\hbar(b_{\tilde{\delta}})^* \mathrm{op}_\hbar(b_\delta) f, f \rangle \\ &= \langle f, \mathrm{op}_\hbar(a) f \rangle + \tilde{\delta} \langle f, \mathrm{op}_\hbar(\chi^2(x, \xi)) f \rangle + O\left(\hbar^2 \|f\|^2\right) \\ &\leq \langle f, \mathrm{op}_\hbar(a) f \rangle + \delta \|f\|^2 + O\left(\hbar^2 \|f\|^2\right). \end{aligned}$$

D'où le résultat.

Un corrolaire important de l'inégalité de Garding est la positivité des limites faibles des transformées de Wigner.

Théorème 2. *Soit (f^h) une famille uniformément bornée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, il existe une suite $(h_n)_{n \in \mathbb{N}}$ tendant vers 0 lorsque n tend vers l'infini et une mesure positive μ telle que*

$$\forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}), \quad \langle f^{h_n}, \mathrm{op}_{h_n}(a) f^{h_n} \rangle \underset{n \to +\infty}{\longrightarrow} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x, \xi) d\mu(x, \xi).$$

La mesure μ est appelée **mesure de Wigner** ou **mesure semi-classique** de la famille (f^h). C'est une mesure sur l'espace des phases qui a de bonnes propriétés géométriques et dont l'analyse permet de démontrer de jolis résultats. Leur utilisation s'est généralisée dans les années 1990 avec les importants articles [17] ou [8] (voir aussi [9]). Elles ont permis récemment de montrer d'importants résultats sur la structure des carrés de suites de fonctions propres du Laplacien sur le tore dans [2]. En effet, on peut relier les mesures semi-classiques aux limites faibles des densités de probabilité de présence comme le montre la proposiion suivante.

Proposition 6. *Soit μ une mesure semi-classique de la famille (f^h) pour la sous-suite h_n.*
(i) Pour tout $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$,

$$\lim_{n\to+\infty} \varphi(x)|f^{\hbar_n}(x)|^2 dx \geq \int \varphi(x)\mu(dx, d\xi).$$

(ii) Si $f^\hbar$ est $\hbar$-oscillante, c'est à dire si

$$\limsup_{\hbar\to 0} \int_{|\xi>R/\hbar} |\widehat{f^\hbar}(\xi)|^2 d\xi \underset{R\to+\infty}{\longrightarrow} 0,$$

alors pour tout $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$,

$$\lim_{n\to+\infty} \varphi(x)|f^{\hbar_n}(x)|^2 dx = \int \varphi(x)\mu(dx, d\xi).$$

3.2.2 Calcul fonctionnel

Notre deuxième application du calcul symbolique concerne le calcul fonctionnel.

Théorème 3. *Soit $F \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ et $F(\mathrm{op}_\hbar(a))$ l'opérateur associé par le calcul fonctionnel, alors dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$*

$$F(\mathrm{op}_\hbar(a)) = \mathrm{op}_\hbar(F(a)) + O(\hbar).$$

Ce théorème repose sur la formule de Helffer-Sjöstrand : pour tout $N_0 \in \mathbb{N}$, il existe un prolongement presque analytique, c'est à dire une fonction $\widetilde{F} \in \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{C})$ coïncidant avec χ sur $\mathbb{R}$ et telle que l'on ait l'estimation

$$\forall z \in \mathbb{C}, \ \mid \overline{\partial}\widetilde{F}(z) \mid \leq C \mid \mathfrak{Im}(z) \mid^{N_0}. \tag{7}$$

On va utiliser l'égalité suivante

$$\forall \lambda \in \mathbb{R}, \ \ F(\lambda) = -\frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} \frac{\overline{\partial}\,\widetilde{F}(z)}{\lambda - z}\,\mathrm{d}L(z),$$

où $\mathrm{d}L(z)$ est la mesure de Lebesgue sur $\mathbb{C}$ ($dL(z) = dxdy$ où $z = x + iy$). Nous renvoyons aux références [11] et [4] pour plus de détails sur la construction de $\widetilde{F}$.

Preuve: Soit maintenant $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, par le théorème spectral,

$$F(\mathrm{op}_\hbar(a)) = -\frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} \overline{\partial}\,\widetilde{F}(z)\,(\mathrm{op}_\hbar(a) - z)^{-1}\ \mathrm{d}L(z). \tag{8}$$

D'après les formules de calcul symbolique et l'estimation (6), pour deux symboles b_1 et b_2, on a

$$\mathrm{op}_\hbar(b_1)\mathrm{op}_\hbar(b_2) = \mathrm{op}_\hbar(b_1 b_2) + \hbar R_\hbar \text{ dans } \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$$

avec

$$\|R_\hbar\|_{\mathcal{L}(L^2)} \leq C \left(\sup_{|\beta|\leq N_0} \int \sup_{x\in\mathbb{R}^d} |\partial_\xi^\beta b_1(x,v)| dv \right) \left(\sup_{|\beta|\leq N_0} \int \sup_{x\in\mathbb{R}^d} |\partial_\xi^\beta b_2(x,v) dv \right).$$

Nous allons appliquer cette formule aux symboles $b_1 = a - z$ et $b_2 = (a-z)^{-1}$; ces symboles ne sont pas à support compact mais génèrent néanmoins des opérateurs bornés (avec des bornes dépendant de z) et à qui on peut appliquer le calcul symbolique, comme on l'a remarqué dans le paragraphe sur le calcul symbolique. Ceci permet d'écrire pour tout $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$,

$$(\mathrm{op}_\hbar(a) - z)^{-1} = \mathrm{op}_\hbar\left((a-z)^{-1}\right) + \hbar R_\hbar,$$

avec $\|R_\hbar\|_{\mathcal{L}(L^2)} \leq C \mid \mathfrak{Im}(z) \mid^{-N_1}$ pour un certain $N_1 \in \mathbb{N}$. En choisissant $N_0 \geq N_1$ dans (7), la formule d'Helffer-Sjöstrand (8) donne alors

$$F(\mathrm{op}_\hbar(a)) = \mathrm{op}_\hbar(F(a)) + O(\hbar) \text{ dans } \mathcal{L}(L^2).$$

3.2.3 Théorème d'Egorov

Revenons à l'équation de Schrödinger qui a été discutée dans l'exposé précédent.

$$i\hbar\partial_t\psi^\hbar = -\frac{h^2}{2}\Delta\psi^\hbar + V(x)\psi^\hbar, \quad \psi^\hbar(t) = \psi_0^\hbar. \tag{9}$$

Rappelons que la fonction

$$H(x,\xi) = \frac{1}{2}|\xi|^2 + V(x)$$

est appelée le Hamiltonien de l'équation. En mettant des hypothèses précises sur V, par exemple en supposant que V est un potentiel C^∞ à croissance au plus quadratique lorsque $|x|$ tend vers l'infini, on peut démontrer l'existence d'une unique solution $\psi^\hbar \in C(\mathbb{R}, L^2(\mathbb{R}^d))$ associée à la donnée $\psi_0^\hbar \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Une façpn d'exprimer ce résultat consiste à dire que l'opérateur $U(t)$

$$U(t) = \mathrm{e}^{-i\frac{t}{\hbar}\mathrm{op}_\hbar(H)}$$

est bien défini. On appelle $U(t)$ le propagateur associé à $\mathrm{op}_\hbar(H)$, c'est un opérateur unitaire qui vérifie

$$i\hbar\frac{d}{dt}U(t) = \mathrm{op}_\hbar(H)U(t), \quad U(0) = \mathrm{Id}. \tag{10}$$

Nous avons aussi vu dans l'exposé précédent comment on associe au symbole $H(x,\xi)$ des quantités "classiques" telles que les trajectoires Hamiltoniennes $\phi^t(x,\xi) = (x(t),\xi(t))$ telles que

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = \xi(t), & x(0) = x, \\ \dot{\xi}(t) = -\nabla V(x(t)), & \xi(0) = \xi. \end{cases}$$

Par ailleurs on associe à ces trajectoires l'opérateur de Liouville $\mathcal{L}_t$ défini par

$$\forall a \in C^\infty(\mathbb{R}^{2d}),\ \ \mathcal{L}_t a = a \circ \phi_{-t}$$

dont l'évolution infinitésimale est donnée par

$$\frac{d}{dt}\left(\mathcal{L}_t a\right) = \{H\ ,\ \mathcal{L}_t a\}. \tag{11}$$

Le théorème d'Egorov décrit la conjugaison d'un opérateur pseudodifférentiel semi-classique par le propagateur de Schrödinger.

Théorème 4. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, alors pour tout $t \in \mathbb{R}$ et dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$,*

$$U(t) \circ \mathrm{op}_\hbar(a) \circ U(-t) = \mathrm{op}_\hbar(\mathcal{L}_t a) + O(\hbar^2|t|).$$

Preuve: On définit pour $s \in [0,t]$, $t > 0$, l'opérateur

$$A_\hbar(s) = U(-s)\mathrm{op}_\hbar(\mathcal{L}_{s-t}a)U(s)$$

En utilisant (10) et (11), on écrit

$$\frac{d}{ds}A_\hbar(s) = U(-s)\left(\frac{1}{i\hbar}\left[\mathrm{op}_\hbar(\mathcal{L}_{s-t}a)\ ,\ \mathrm{op}_\hbar(H)\right] + \mathrm{op}_\hbar\left(\{H\ ,\ \mathcal{L}_{s-t}a\}\right)U(s).$$

Compte tenu du calcul symbolique

$$\left[\mathrm{op}_\hbar(\mathcal{L}_{s-t}a)\ ,\ \mathrm{op}_\hbar(H)\right] = \frac{\hbar}{i}\mathrm{op}_\hbar\left(\{H\ ,\ \mathcal{L}_{s-t}a\} + O(\hbar^3),\right.$$

d'où

$$\frac{d}{ds}A_\hbar(s) = O(\hbar^2),$$

ce qui donne le résultat après intégration entre $s = 0$ et $s = t$

Ce théorème permet de montrer que, si $(f^\hbar)_{\hbar>0}$ est une famille uniformément bornée de $L^2(\mathbb{R}^d)$, les mesures semiclassiques associées à la famille $\left(U(t)f^\hbar\right)_{\hbar>0}$ se déduisent de celles de $(f^\hbar)_{\hbar>0}$ par transport par le flot ϕ_t. Il permet aussi de développer des méthodes numériques efficaces pour calculer au cours du temps l'action d'un observable sur la fonction d'onde $\psi^\hbar(t)$, c'est à dire la transformée de Wigner de la famille $(\psi^\hbar(t))$. En effet, il existe des méthodes efficaces de résolution numérique permettant de calculer les trajectoires Hamiltoniennes ϕ^t, et donc l'opérateur de Liouville $\mathcal{L}_t$. On obtient alors une valeur approchée de la transformée de Wigner au temps t en écrivant

$$w^\hbar(t,x,\xi) \sim \mathcal{L}_t w^\hbar(0,x,\xi).$$

Cette méthode est beaucoup moins coûteuse en termes de temps de calcul que la résolution numérique de l'équation de Schrödinger. D'autant plus que les équations du flot ϕ^t sont indépendantes du petit paramètre $\hbar$ alors que sa présence dans (9) impose d'utiliser des pas de discrétisation de très petite taille. Ces méthodes ont été développées en particulier dans [14, 6] avec des applications en chimie quantique. On trouvera aussi dans [15] des améliorations du schéma numérique utilisant les termes d'ordre $\hbar$ où $\hbar^2$ du calcul symbolique.

4 Opérateurs pseudodifférentiels sur une variété et sur le tore

Avant d'esquisser la généralisation de la notion d'opérateurs pseudodifférentiels au cas d'une variété, nous commençons par étudier la transformation d'un opérateur pseudodifférentiel semi-classique par changement de variable. Cela nous permettra de mieux comprendre la nature géométrique de l'espace des phases et de pouvoir étendre ce calcul au cas des variétés. Enfin, nous étudierons le cas du tore.

4.1 Opérateurs pseudodifférentiels et changement de variables

Soit ψ un C^1 difféomorphisme d'un voisinage U de $x_0 \in \mathbb{R}^d$ dans un voisinage V de $0 \in \mathbb{R}^d$. Si f est une fonction à support dans U, on lui associe $\psi_* f$ à support dans V définie par

$$\psi_* f = f \circ \psi^{-1}.$$

L'application ψ_* ainsi définie admet comme inverse ψ^*,

$$\psi^* f = f \circ \psi.$$

Proposition 7. *Pour tout $a \in C_0^\infty(V \times \mathbb{R}^d)$, dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$,*

$$\psi^* \mathrm{op}_\hbar(a) \psi_* = \mathrm{op}_\hbar(a_\psi) + O(\hbar)$$

avec

$$a_\psi(x,\xi) = a(\psi(x),\, {}^t\nabla\psi(x)^{-1}\xi).$$

Preuve: On remarque que si f est à support dans V,

$$\psi^* \mathrm{op}_\hbar(a)\psi_* f(x) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a\left(\frac{\psi(x)+z}{2}, \xi\right) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(\psi(x)-z)} f\circ\psi^{-1}(z)dz\, d\xi.$$

Après changement de variable $z = \psi(y)$, on voit que le noyau de cet opérateur est la fonction

$$k_\hbar(x,y) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} a\left(\frac{\psi(x)+\psi(y)}{2}, \xi\right) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(\psi(x)-\psi(y))} J_\psi(y) d\xi,$$

où J_ψ est le Jacobien du changement de variable. Ecrivons

$$k_\hbar(x,y) = \hbar^{-d} K_\hbar\left(\frac{x+y}{2}, \frac{x-y}{\hbar}\right)$$

avec

$$\begin{aligned} K_\hbar(X,v) \quad &= \quad (2\pi)^{-d}\int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(\psi(X+\hbar v/2)-\psi(X-\hbar v/2))} \\ &\qquad \times a\left(\frac{1}{2}\left(\psi\left(X+\frac{\hbar}{2}v\right)+\psi\left(X-\frac{\hbar}{2}v\right)\right), \xi\right) J_\psi\left(X+\frac{\hbar}{2}v\right) d\xi. \end{aligned}$$

Ici encore, nous allons utiliser des formules de Taylor et écrire

$$\begin{aligned}
J_\psi\left(X+\frac{\hbar}{2}v\right) &= J_\psi(X)+\hbar v A(X,\hbar v),\\
\psi\left(X+\frac{\hbar}{2}v\right)+\psi\left(X-\frac{\hbar}{2}v\right) &= 2\psi(X)+\hbar^2 B(X,\hbar v)v\cdot v,\\
\psi\left(X+\frac{\hbar}{2}v\right)-\psi\left(X-\frac{\hbar}{2}v\right) &= \hbar\,\nabla\psi(X)v+\hbar^3 C(x,\hbar v)[v,v,v],\\
\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot\left(\psi\left(X+\frac{\hbar}{2}v\right)-\psi\left(X-\frac{\hbar}{2}v\right)\right)} &= \mathrm{e}^{i\xi\cdot(\nabla\psi(X)v)}\left(1+\hbar^2\xi\cdot D(X,\hbar v)[v,v,v]\right),
\end{aligned}$$

où les fonctions A, B, C et D sont C^∞ bornées ainsi que leurs dérivées, uniformément par-rapport à $\hbar\in(0,1]$. On peut alors transformer $K_\hbar$ de la façon suivante

$$\begin{aligned}
K_\hbar(X,v) &= (2\pi)^{-d}\int_{\mathbb{R}^d}\mathrm{e}^{i\xi\cdot(\nabla\psi(X)v)}a\left(\psi(X),\xi\right)J_\psi(X)d\xi\\
&\quad +\hbar\sum_{|\alpha|\le 3}\int \mathrm{e}^{i\xi\cdot(\nabla\psi(X)v)}\Theta_{\alpha,h}(X,\xi,\hbar v)v^\alpha d\xi
\end{aligned}$$

où les fonctions $\Theta_{\alpha,\hbar}$ sont C^∞ et à support compact en ξ, et pour tout $\beta\in\mathbb{N}^d$, $\partial_\xi^\beta\Theta_{\alpha,\hbar}$ est bornée uniformément par-rapport à $\hbar\in(0,1]$. On utilise alors des intégrations par parties et un changement de variable pour écrire

$$\begin{aligned}
K_\hbar(X,v) &= (2\pi)^{-d}\int_{\mathbb{R}^d}\mathrm{e}^{i\,{}^t\nabla\psi(X,v)\xi\cdot v}a\left(\psi(X),\xi\right)J_\psi(X)d\xi\\
&\quad +\hbar\,R_\hbar(X,v),\\
&= (2\pi)^{-d}\int_{\mathbb{R}^d}\mathrm{e}^{i\xi\cdot v}a\left(\psi(X),\,{}^t\nabla\psi(X)^{-1}\xi\right)d\xi\\
&\quad +\hbar\,R_\hbar(X,v),\\
\text{où } R_\hbar(X,v) &= \sum_{|\alpha|\le 3}\int \mathrm{e}^{i\xi\cdot(\nabla\psi(X)v)}\Theta_{\alpha,\hbar}(X,\xi,hv)v^\alpha d\xi\\
&= \sum_{|\alpha\le 3}\int \mathrm{e}^{i\xi\cdot v}(i\nabla\psi(X)^{-1}\partial_\xi)^\alpha\Theta_{\alpha,\hbar}(X,\,{}^t\nabla\psi(X)^{-1}\xi,\hbar v)J_\psi(X)^{-1}d\xi
\end{aligned}$$

Les estimations énoncées sur les fonctions $\Theta_{\alpha,\hbar}$ permettent d'obtenir qu'il existe une constante $C>0$ telle que pour tout $\hbar\in(0,1)$,

$$\int_{\mathbb{R}^d}\sup_{X\in\mathbb{R}^d}|R_\hbar(X,v)|dv\le C.$$

L'opérateur de noyau $(x,y)\mapsto\hbar^{-d}R_\hbar\left(\frac{x+y}{2},\frac{x-y}{\hbar}\right)$ est donc uniformément borné sur $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ et l'opérateur $\psi^*\mathrm{op}_\hbar(a)\psi_*$ coïncide à $O(\hbar)$ près dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$ avec l'opérateur de noyau

$$(x,y)\mapsto(2\pi)^{-d}\int_{\mathbb{R}^d}\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}a\left(\psi\left(\frac{x+y}{2}\right),\,{}^t\nabla\psi\left(\frac{x+y}{2}\right)^{-1}\xi\right)d\xi,$$

c'est à dire avec l'opérateur $\mathrm{op}_\hbar(a_\psi)$.

4.2 Opérateurs pseudodifférentiels sur une variété et nature géométrique de l'espace des phases

Le résultat de la section 4.1 va permettre de définir les opérateurs pseudodifférentiels sur une variété M. Rappelons que lorsque M est une sous variété de $\mathbb{R}^d$, il existe une famille d'homéomorphismes $\mathcal{F}$ dont les éléments γ envoient des ouverts U_γ de M sur des ouverts V_γ de $\mathbb{R}^d$ avec les deux propriétés suivantes :

1. Les ouverts U_γ recouvrent M, $M = \cup_{\gamma\in\mathcal{F}} U_\gamma$,
2. Les recouvrements sont réguliers : si $\gamma_1, \gamma_2 \in \mathcal{F}$, alors $\gamma_2 \circ \gamma_1^{-1}$ est une application C^∞ de $\gamma_1(U_{\gamma_1} \cap U_{\gamma_2})$ dans $\gamma_2(U_{\gamma_1} \cap U_{\gamma_2})$.

On appelle la famille $\{(\gamma, U_\gamma),\ \gamma \in \mathcal{F}\}$ un atlas pour M et on dit que l'élément U_γ est une carte locale de M.

Ce sont ces cartes locales qui permettent de définir des fonctions sur M. La notion fondamentale est la notion de fibré vectoriel au-dessus de M. Les fibrés qui nous intéressent sont le fibré tangent à M que l'on note TM et le fibré cotangent à M que l'on note T^*M. Le fibré TM est la collection des espaces tangents T_xM aux points $x \in M$ et le fibré T^*M est la collection des espaces T_x^*M qui sont les espaces duaux des espaces T_xM, c'est-à- dire les espaces des formes linéaires sur T_xM.

Si ψ est un C^1 difféomorphisme local de M, il induit une application $T\psi$ de TM dans lui-même et une application $T^*\psi$ de T^*M dans lui-même définies comme suit : notons z les éléments de $T_x\mathbb{R}^d$ et ξ ceux de $T_x^*\mathbb{R}^d$, on a

$$T_x\psi : z \mapsto \nabla\psi(x)z \text{ et } T_x^*\psi : \xi \mapsto {}^t\nabla\psi(x)^{-1}\xi.$$

En effet, $T_x^*\psi(\xi)$ est la forme linéaire définie par

$$\forall z \in T_xM,\ \ T_x^*\psi(\xi)(T_x\psi(z)) = \xi(z).$$

On remarque alors que pour tout $z \in T_xM$

$$\xi\left(T_x\psi(z)\right)) = \xi \cdot (\nabla\psi(x)z) = \left({}^t\nabla\psi(x)\xi\right) \cdot z,$$

et on obtient $T^*\psi(\xi) = {}^t\nabla\psi(x)^{-1}\xi$.

Ces notions sont triviales lorsque $M = \mathbb{R}^d$ mais il est intéressant de remarquer que les règles de transformation du symbole d'un opérateur pseudodifférentiel par changement de variable montrent que le symbole définit une fonction de l'espace cotangent de $\mathbb{R}^d$. C'est cette remarque fondamentale qui va permettre de définir les opérateurs pseudodifférentiels sur M en prenant pour ensemble de symboles des fonctions à support compact dans T^*M. La notion de carte locale va alors nous permettre de transporter la notion d'opérateurs pseudodifférentiels que nous avons définie sur $\mathbb{R}^d$ sur la variété M, la règle de transformation par changement de variable permettant de recoller les définitions à l'intersection de deux cartes.

Il faut noter que les résultats de calcul symbolique (adjoint, composition), ainsi que ceux concernant le calcul fonctionnel restent valables dans le cadre du calcul pseudo semi-classique sur une variété. De même, le théorème d'Egorov reste valable sur une sous-variété et ce résultat sera utilisé dans le prochain exposé (les estimations pour des grands temps peuvent néanmoins différer).

4.3 Opérateurs pseudodifférentiels sur le tore

Terminons cet exposé par un cours paragraphe expliquant comment définir les opérateurs pseudodifférentiels sur le tore. Nous allons utiliser le fait qu'une fonction définie sur le tore $\mathbb{T}^d$ s'étend par périodicité en une fonction définie sur $\mathbb{R}^d$ tout entier. Considérons maintenant un observable a, c'est à dire une fonction sur l'espace cotangent du tore $T^*\mathbb{T}^d = \mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d$ et notons encore une fois $k_\hbar(x, y)$ la fonction

$$k_h(x,y) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} a\left(\frac{x+y}{2}, \xi\right) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} d\xi.$$

La fonction $k_h(x, y)$ est définie sur $\mathbb{T}^d \times \mathbb{T}^d$ et s'étend par périodicité en y en une fonction de $\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d$. On définit alors l'opérateur pseudodifférentiel de symbole a par son action sur les fonctions $f \in \mathcal{S}(\mathbb{T}^d)$ par

$$\forall x \in \mathbb{T}^d, \ \ \mathrm{op}_\hbar(a) f(x) = \int_{\mathbb{R}^d} k_\hbar(x, y) f(y) dy,$$

où la fonction f a été étendue par périodicité en une fonction de $L^2_{loc}(\mathbb{R}^d)$.

Remarquons que l'on peut aussi décrire l'action de $\mathrm{op}_\hbar(a)$ avec un noyau défini sur $\mathbb{T}^d \times \mathbb{T}^d$:

$$\forall x \in \mathbb{T}^d, \ \ \mathrm{op}_\hbar(a) f(x) = \sum_{n\in(2\pi\mathbb{Z})^d} \int_{\mathbb{T}^d} k_\hbar(x, y+n) f(y) dy.$$

On remarquera que cet opérateur est bien défini sur $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ grâce à la compacité en ξ de la fonction $a(x, \xi)$.

Les opérateurs pseudodifférentiels sur le tore jouissent des mêmes propriétés que ceux que nous avons définis sur $\mathbb{R}^d$: caractère borné sur $L^2(\mathbb{T}^d)$, calcul symbolique, rôle prédominant de la diagonale dans le noyau.

En revanche, la formule donnant la trace de l'opérateur comme l'intégrale du symbole n'est valable qu'en première approximation en $\hbar$

Proposition 8. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d)$, alors*

$$\mathrm{Tr}\,(\mathrm{op}_\hbar(a)) = \int_{\mathbb{T}^d\times\mathbb{R}^d} a(x,\xi) dx\, d\xi + O(\hbar).$$

Preuve: On utilise la formule du noyau sur $\mathbb{T}^d \times \mathbb{T}^d$, ce qui donne

$$\begin{aligned}
\mathrm{Tr}\ (\mathrm{op}_\hbar(a)) &= \sum_{n\in(2\pi\mathbb{Z})^d} \int_{\mathbb{T}^d} k_\hbar(x, x+n) dx \\
&= (2\pi\hbar)^{-d} \sum_{n\in(2\pi\mathbb{Z})^d} \int_{\mathbb{T}^d\times\mathbb{R}^d} a\left(x+\frac{n}{2}, \xi\right) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\xi\cdot n} dx d\xi \\
&= (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{T}^d\times\mathbb{R}^d} a\left(x, \xi\right) dx d\xi + O(\hbar),
\end{aligned}$$

où l'on a utilisé que pour $n \neq 0$, une intégration par parties donne

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{T}^d\times\mathbb{R}^d} a\left(x+\frac{n}{2}, \xi\right) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\xi\cdot n} dx d\xi &= \frac{\hbar}{in^2} \int_{\mathbb{T}^d\times\mathbb{R}^d} n\cdot\nabla_\xi a\left(x+\frac{n}{2}, \xi\right) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}\xi\cdot n} dx d\xi \\
&= O(\hbar).
\end{aligned}$$

Il peut être éclairant de voir le lien entre les opérateurs ainsi définis et l'analyse en coefficients de Fourier que l'on fait classiquement sur le tore. Soit $f \in L^2(\mathbb{T}^d)$, l'analyse de Fourier permet d'écrire

$$f(x) = (2\pi)^{-d/2} \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} \widehat{f}(k)\mathrm{e}^{ik\cdot x} \text{ avec } \widehat{f}(k) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{T}^d} f(x)\mathrm{e}^{-ik\cdot x}.$$

Proposition 9. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{T}^d \times \mathbb{R}^d)$ et*

$$\widehat{a}_k(\xi) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{T}^d} a(x,\xi)\mathrm{e}^{-ix\cdot\xi} dx.$$

Alors pour tout $f \in \mathcal{S}(\mathbb{T}^d)$,

$$\mathrm{op}_\hbar(a)f(x) = (2\pi)^{-d/2} \sum_{k,j\in\mathbb{Z}^d} \widehat{a}_{k-j}\left(\hbar\frac{k+j}{2}\right)\widehat{f}(j)\mathrm{e}^{ik\cdot x}. \tag{12}$$

Preuve: Il suffit de faire apparaître les coefficients de Fourier dans l'expression de $\mathrm{op}_\hbar(a)f(x)$.

Remarquons qu'une version discrète du lemme de Schur permet d'utiliser cette formule pour démontrer que l'opérateur $\mathrm{op}_\hbar(a)$ est uniformément borné sur $L^2(\mathbb{T}^d)$.

Cette formule est à rapprocher de celles obtenues en utilisant la formule d'inversion de Fourier pour exprimer les opérateurs de multiplication en position et en impulsion : soit $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{T}^d)$ et $\Phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$, pour $f \in L^2(\mathbb{T}^d)$, on a

$$\begin{aligned}
\varphi(x)f(x) &= (2\pi)^{-d/2} \sum_{j,k\in\mathbb{Z}^d} \widehat{\varphi}(k-j)\widehat{f}(j)\mathrm{e}^{ik\cdot x},\\
\Phi(\hbar D)f(x) &= (2\pi)^{-d/2} \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} \Phi(\hbar k)\widehat{f}(k)\mathrm{e}^{ik\cdot x}.
\end{aligned}$$

Afin de voir une expression un peu similaire à celle de l'opérateur de multiplication en position, on peut écrire

$$\begin{aligned}
\Phi(hD)f(x) &= (2\pi)^{-d/2} \sum_{j,k\in\mathbb{Z}^d} \Phi(\hbar k)\delta_{k-j}\widehat{f}(j)\mathrm{e}^{ik\cdot x}\\
&= (2\pi)^{-d/2} \sum_{j,k\in\mathbb{Z}^d} \Phi(\hbar j)\delta_{k-j}\widehat{f}(j)\mathrm{e}^{ik\cdot x}\\
&= (2\pi)^{-d/2} \sum_{j,k\in\mathbb{Z}^d} \Phi\left(\hbar\frac{k+j}{2}\right)\delta_{k-j}\widehat{f}(j)\mathrm{e}^{ik\cdot x}.
\end{aligned}$$

La dernière formule a le mérite de faire jouer des rôles symétriques à j et k et on aurait pu utiliser la formule (12 pour définir l'opérateur $\mathrm{op}_\hbar(a)$. pour $a \in C_0^\infty(\mathbb{T}^d)$. Remarquons qu'il s'agit bien de la quantification de Weyl : si a est à valeurs réelles, l'opérateur $\mathrm{op}_\hbar(a)$ est auto-adjoint du fait que $\frac{k+j}{2}$ apparait dans la variable ξ et non k ou j.

Références

[1] S. Alinhac and P. Gérard, *Pseudo-differential operators and the Nash-Moser Theorem*, Graduate Studies in Mathematics, **82**, AMS, 2007.

[2] N. Anantharaman and F. Macià, Semiclassical measures for the Schrödinger equation on the torus, (2010). Preprint arXiv :1005.0296v2.

[3] H. Bahouri, C. Fermanian Kammerer and I. Gallagher, Phase-space analysis and pseudodifferential calculus on the Heisenberg group, *Astérisque*, **345** (2012).

[4] E. B. Davies, *Spectral theory and differential operators*, Cambridge University Press, 1995.

[5] M. Dimassi and J. Sjöstrand, *Spectral asymptotics in the semi-classical limit*, volume 268 of *London Mathematical Society Lecture Note Series.* Cambridge University Press, Cambridge, 1999.

[6] C. Fermanian Kammerer and C. Lasser, Single switch surface hopping for molecular dynamics. *J Math. Chem.* (2012) 50, p.620–635.

[7] V. Fischer and M. Ruzhansky, *A pseudo-differential calculus on graded Lie groups*, preprint sur arXiv :1209.262.

[8] P. Gérard and É. Leichtnam, Ergodic properties of eigenfunctions for the Dirichlet problem, *Duke Math. J.*, 71(2), p. 559–607, 1993.

[9] P. Gérard, P. Markowich, N. Mauser and F. Poupaud : Homogenization limits and Wigner transforms. *Commun. Pure Appl. Math.* **50**, no. 4 (1997), p. 323–379.

[10] B. Helffer, 30 ans d'analyse semi-classique, bibliographie commentée (page web de l'auteur).

[11] B. Helffer and J. Sjöstrand, Equation de Schrödinger avec champ magnétique et équation de Harper, volume 345 of *Lecture Notes in Physics.* Springer Verlag, 1989.

[12] L. Hörmander, The Weyl calculus of Pseudodifferential operators, CPAM 32 (1979).

[13] I. L. Hwang, The L^2 boundedness of pseudodifferential operators, *Trans. Amer. Math. Soc.*, **302** (1987), p. 55-76.

[14] C. Lasser and S. Röblitz, Computing expectation values for molecular quantum dynamics SIAM J. Sci. Comput. 32, p. 1465-1483 (2010)

[15] C. Lasser, Corrections to Wigner type phase space methods, preprint sur arXiv :1403.2839

[16] N. Lerner, *Metrics on the Phase Space and Non-Selfadjoint Operators*, Birkhäuser, 2014

[17] P.-L. Lions and T. Paul, Sur les mesures de Wigner, *Rev. Mat. Iberoamericana*, 9, no. 3 (1993), p. 553–618.

[18] V.P. Maslov, Théorie des perturbations et méthodes asymptotiques, Dunod, 1972.

[19] M. Ruzhansky and V. Turunen, On the Fourier analysis of operators on the torus. Modern trends in pseudodifferential operators, *Operator Theory, Analysis and Mathematical Physics*, **172** (2007), p. 87–105. Birkhaüser, Basel.

[20] M. Shubin, Pseudodifferential operators and spectral theory, Nauka Moscow, 1978.

[21] A. Voros, Développements semi-classiques, thèse d'état, 1977.

[22] E. P. Wigner, *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra*. New York, Academic Press, 1959.

[23] M. Zworski, *Semi-classical analysis*, Graduate Studies in Mathematics, 138, AMS, 2012.