Théorèmes de Szegő pour les matrices de Toeplitz
T.E.R. encadré par Alix Deleporte

Thomas Chen, Tom Froissart

23 octobre 2025

Résumé

Ce papier se décompose en deux grandes parties : on commence par donner une preuve du second théorème de Szegő basée sur les travaux de Kac [5] qui donne une asymptotique à deux termes du log det pour les matrices de Toeplitz. On s'intéresse ensuite aux fonctions propres de l'équation de Schrödinger discrétisée dans le cas d'un potentiel quelconque. Cette seconde partie adapte les outils utilisés dans le cas continu (méthode WKB [7] et estimées d'Agmon [1]) pour tenter d'obtenir des résultats similaires.

Introduction

En 1952, Szegő démontre son second théorème limite qui donne une asymptotique à deux termes du log det pour les matrices de Toeplitz de fonctions positives et de dérivée contractante.
Le premier papier qui a inspiré ce T.E.R. est écrit par Kac (1953) et propose une preuve du théorème de Szegő qui s'appuie sur une identité combinatoire surprenante due à Dyson et Hunt. Notre travail a d'abord consisté à comprendre et reconstituer ces deux preuves dans le détail et dans un cadre plus général (fonction L^2 bornées dont la dérivée est dans l'algèbre de Wiener). Nos démonstrations supposent la fonction paire afin de simplifier les calculs mais le théorème reste vrai sans cette hypothèse. Pour certains calculs, nous nous sommes inspirés de travaux plus récents [3] qui montrent une généralisation du théorème de Szegő pour les opérateurs définis sur une surface de Zoll.

Pour motiver la seconde partie de ce T.E.R., on a remarqué qu'on pouvait comprendre les matrices de Toeplitz comme des matrices associées aux fonctions propres d'un opérateur différentiel (par exemple, le laplacien dans le cas du théorème de Szegő). Il s'avère aussi que ce théorème a des applications en probabilités, où il permet d'énoncer une forme de théorème central limite qui annonce que les valeurs propres de matrices unitaires aléatoires seront asympotiquement uniformément distribuées sur le cercle unité [4].

Nous avons décidé de nous concentrer sur la recherche de fonctions propres pour l'opérateur différentiel de l'équation de Schrödinger discrétisée $-\frac{1}{N^2}\Delta + V$, le cas continu ayant déjà été traité pour un potentiel lisse [1]. Il s'agit donc dans cette seconde partie d'adapter les outils utilisés dans le cas continu pour déterminer les éventuelles fonctions propres. Nous avons réussi à retrouver le comportement oscillant dans la zone intérieure (approximation WKB [7]) et la décroissance à l'extérieur (via les estimées d'Agmon).

Par manque de temps, nous n'avons pas pu traiter la question du recollement qui aurait permis d'achever le travail et de complètement déterminer les éléments propres. Il semblerait qu'une bonne façon de procéder soit d'utiliser la fonction d'Airy qui a justement le comportement recherché.

1 Théorème de Szegő

1.1 Enoncé du théorème et préléminaires

1.1.1 Définitions

Définition 1 (Coefficient de Fourier)**.** On note $e_k : t \in [0, 2\pi] \mapsto e^{ikt}$. Alors pour toute fonction $f \in \mathrm{L}^2([0, 2\pi])$, on note $\forall k \in \mathbb{Z}, c_k(f) := \widehat{f}(k) := \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} f(t)e_{-k}(t)\mathrm{d}t$.

Définition 2 (Matrice de Toeplitz)**.** Soit $a \in \mathrm{L}^2([0, 2\pi])$. Notons $(a_n)_{n\in\mathbb{Z}}$, la suite des coefficients de Fourier de a. Soit $N \in \mathbb{N}$. On définit la matrice $T_N(a)$ comme étant

$$\begin{pmatrix} a_0 & a_{-1} & \cdots & \cdots & a_{-N} \\ a_1 & a_0 & a_{-1} & & \vdots \\ \vdots & a_1 & a_0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & a_1 \\ a_N & \cdots & \cdots & a_1 & a_0 \end{pmatrix}.$$

Observation 1. Quelle est l'idée derrière une matrice de Toeplitz ? $\mathrm{L}^2([0, 2\pi])$ est un espace de Hilbert où les $(e_k)_{k\in\mathbb{Z}}$ forment une base hilbertienne. Pour toute fonction $a \in \mathrm{L}^2([0, 2\pi])$, a s'écrit

$$a = \sum_{k\in\mathbb{Z}} a_k e_k.$$

Si l'on se place dans le cadre des matrices infinies, il est possible de construire une matrice dont les coefficients en (i, j) vaut a_{i-j}. La matrice $T_N(a)$ est alors la troncature de cette matrice infinie pour $0 \leq i, j \leq N$. Nous donnerons un énoncé en la proposition 1.

Le théorème de Szegő s'énonce alors comme suit.

Théorème 1 (Szegő)**.** *Soit $a : [0, 2\pi] \to \mathbb{C}$ une fonction $L^2([0, 2\pi])$ paire. On suppose que $\|a\|_\infty < 1$ et $\sum_{\ell\in\mathbb{Z}^*} |a_\ell||\ell| < +\infty$. Alors*

$$\log\det(I_{N+1} + T_N(a)) = (N + 1)c_0(\log(1 + a)) + \sum_{n=0}^{\infty} n\|c_n(\log(1 + a))\|^2 + o_{N\to\infty}(1).$$

La suite de cette partie est consacrée à la preuve du théorème.

1.2 Dyson-Hunt

Dans la suite, on note $\mathbb{1}(x > 0)$, l'indicatrice de $\mathbb{R}_+^*$.

La preuve qui suit du théorème de Szegő, précedemment cité, utilise une identité remarquable assez surprenante due à Dyson-Hunt.

Théorème 2 (Dyson-Hunt pour les cycles)**.**
Soit $(x_n)_{n\in\mathbb{N}}$, une suite réelle. Considérons $c := (1\ 2\ \cdots\ n)$. Alors en notant C_n, le sous-groupe engendré

par σ,

$$\sum_{\sigma \in C_n} \max\left\{\sum_{i=1}^{k} x_{\sigma(i)} : k \in [\![0, n]\!]\right\} - \max\left\{\sum_{i=1}^{k} x_{\sigma(i)} : k \in [\![0, n-1]\!]\right\} = \sum_{i=1}^{n} x_i \mathbb{1}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i > 0\right).$$

Posons alors quelques notations avant de passer à la preuve.

Définition 3. On note C_n le sous-groupe engendré par $(1\ 2\ \cdots\ n) =: c$.

Définition 4. Pour toute suite de réels $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$, on note, pour tout $n \in \mathbb{N}^*$

$$w_n(x_1, \cdots, x_n) = \max\left\{\sum_{i=1}^{k} x_i : k \in [\![0, n]\!]\right\}.$$

On tire alors l'identité suivante :

$$\forall n \in \mathbb{N}, w_{n+1}(x_1, \cdots, x_{n+1}) = \begin{cases} w_n(x_1, \cdots, x_n) & \text{si } \displaystyle\sum_{i=1}^{n+1} x_i \leq 0 \\ w_n(x_2, \cdots, x_{n+1}) + x_1 & \text{si } \displaystyle\sum_{i=1}^{n+1} x_i > 0. \end{cases} \qquad (1)$$

Passons à la preuve de l'identité de Dyson-Hunt 2.

Démonstration. (de Dyson-Hunt pour les cycles) Avec les notations précédentes, on peut écrire

$$\sum_{\sigma \in C_n} \Big(w_k(\ell_{\sigma(1),\cdots,\sigma(k)}) - w_{k-1}(\ell_{\sigma(1),\cdots,\sigma_{k-1}})\Big) = \sum_{\sigma \in C_n} w_k(\ell_{\sigma(1),\cdots,\sigma(k)}) - \sum_{\sigma \in C_n} w_{k-1}(\ell_{\sigma(1),\cdots,\sigma_{k-1}}).$$

En vertu de l'égalité 1, la somme est une somme nulle lorsque $\displaystyle\sum_{i=1}^{n} \ell_i \leq 0$. Si cette dernière est strictement positive, on a alors

$$\begin{aligned}
\sum_{\sigma \in C_n} \Big(w_k(\ell_{\sigma(1),\cdots,\sigma(k)}) - w_{k-1}(\ell_{\sigma(1),\cdots,\sigma_{k-1}})\Big) &= \sum_{\sigma \in C_n} w_k(\ell_{\sigma(1),\cdots,\sigma(k)}) - \sum_{\sigma \in C_n} w_{k-1}(\ell_{\sigma(1),\cdots,\sigma(k-1)}) \\
&= \sum_{\sigma \in C_n} \Big(w_{k-1}(\ell_{\sigma(2),\cdots,\sigma(k)}) + x_{\sigma(1)}\Big) - \sum_{\sigma \in C_n} w_{k-1}(\ell_{\sigma(1),\cdots,\sigma(k-1)}) \\
&\underset{\sigma' = \sigma \circ c}{=} \sum_{\sigma \in C_n} \Big(w_{k-1}(\ell_{\sigma(2),\cdots,\sigma(k)}) + x_{\sigma(1)}\Big) - \sum_{\sigma' \in C_n} w_{k-1}(\ell_{\sigma'(2),\cdots,\sigma'(k)}) \\
&= \sum_{\sigma \in C_n} x_{\sigma(1)} \\
&= \sum_{i=1}^{n} x_i.
\end{aligned}$$

Ainsi, on a bien

$$\sum_{\sigma \in C_n} \max\left\{\sum_{i=1}^{k} x_{\sigma(i)} : k \in [\![0, n]\!]\right\} - \max\left\{\sum_{i=1}^{k} x_{\sigma(i)} : k \in [\![0, n-1]\!]\right\} = \sum_{i=1}^{n} x_i \mathbb{1}\left(\sum_{i=1}^{n} x_i > 0\right).$$

$\square$

1.3 Quelques inégalités

L'objectif de cette sous-partie est d'établir quelques inégalités cruciales pour la preuve du théorème de Szegő. Pour cela, introdusions quelques notations.

Définition 5 (Norme de Schatten)**.** Soit $p \in \mathbb{N}^*$. A toute matrice A, on associe $\sigma(A)$, le vecteur composé des valeurs singulières de A. Alors on définit la norme p de Schatten comme étant

$$\|A\|_{\mathfrak{S}_p} = \|\sigma(A)\|_p.$$

C'est une norme et on va bientôt majorer des objets avec cette norme.

Définition 6 (π_N)**.** On définit l'application

$$\begin{array}{rccc} \Pi_N : & \mathrm{L}^2([0,2\pi]) & \to & \mathrm{L}^2([0,2\pi]) \\ & f = \displaystyle\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \widehat{f}(n)e_n & \mapsto & \displaystyle\sum_{n=0}^{N} \widehat{f}(n)e_n \end{array}.$$

C'est une projection.

Définition 7 (Opérateur multiplicateur)**.** Soit $a \in \mathrm{L}^2([0,2\pi])$. On définit l'application

$$\begin{array}{rccc} M(a) : & \mathrm{L}^2([0,2\pi]) & \to & \mathrm{L}^2([0,2\pi]) \\ & f & \mapsto & af \end{array}.$$

Proposition 1. Pour tout $N \in \mathbb{N}$, on a $\Pi_N M(a) \Pi_N = T_N(a)$.

Démonstration. Soit $f \in \mathrm{L}^2([0,2\pi])$. On note $f = \displaystyle\sum_{n=-\infty}^{+\infty} \widehat{f}(n)e_n$. Alors

$$\Pi_N a \Pi_N f = \sum_{k=0}^{N}\sum_{j=0}^{N} \widehat{f}(j)\widehat{ae_j}(k)e_k.$$

Un calcul montre que

$$\widehat{ae_j}(k) = \widehat{a}(k-j).$$

Ainsi,

$$\Pi_N a \Pi_N f = \sum_{k=0}^{N}\sum_{j=0}^{N} \widehat{f}(j)\widehat{a}(k-j)e_k.$$

De l'autre côté,

$$T_n(a)f = \left(\sum_{j=0}^{N} a_{k-j}\widehat{f}(j)\right)_{1\leq k\leq n}.$$

D'où le résultat. □

Cette identité nous permet alors d'obtenir des informations sur une matrice de Toeplitz à partir de l'opérateur Π_N. On a alors les inégalités suivantes.

Proposition 2. Soit $a \in \mathrm{L}^2([0,2\pi])$.

1. $|||T_n(a)|||_{\mathrm{L}^2\to\mathrm{L}^2} \leq \|a\|_\infty$.

2. $\forall M \in \mathcal{M}_{\mathbb{Z}}(\mathbb{K}), \|M\|_{\mathfrak{S}_1} \leq \sum_{i,j \in \mathbb{Z}} |a_{i,j}|$.
3. $\mathrm{Tr}([\Pi_N, a]^2) \leq 2 \sum_{\ell \in \mathbb{Z}^*} |a_\ell|^2 |\ell|$.
4. $\|[\Pi_N, a]\|_{\mathfrak{S}_1} \leq 2 \sum_{\ell \in \mathbb{Z}^*} |a_\ell||\ell|$.

Démonstration. 1. Soit $a \in \mathrm{L}^\infty([0,2\pi]) \cap \mathrm{L}^2([0,2\pi])$. Alors

$$\forall f \in \mathrm{L}^2([0,2\pi]), \|T_n(a)f\|_2 = \|\pi_N a \pi_N f\|_2 \leq \|\pi_N a\|_\infty \|\pi_N f\|_2 \leq \|a\|_\infty \|f\|_2.$$

De fait,

$$|||T|||_n(a) \leq \|a\|_\infty.$$

2. Il est aisé de montrer que $\|E_{ij}\|_{\mathfrak{S}_1} = 1$ pour tout $i, j \in \mathbb{Z}$. De fait, par inégalité triangulaire,

$$\|M\|_{\mathfrak{S}_1} = \left\| \sum_{i,j \in \mathbb{Z}} a_{ij} E_{jk} \right\|_{\mathfrak{S}_1} \leq \sum_{i,j \in \mathbb{Z}} |a_{ij}| \|E_{ij}\|_{\mathfrak{S}_1} = \sum_{i,j \in \mathbb{Z}} |a_{ij}|.$$

3. Calculons les coefficients du commutateur $[\pi_N, a]$. Soit $j, k \in \mathbb{Z}$. Alors $([\pi_N, a])_{k,j} = \langle [\pi_N, a] e_k, e_j \rangle$. D'un côté, on a

$$\Pi_N a e_k = \sum_{n=1}^{N} \widehat{ae_k}(n) e_n = \sum_{n=1}^{N} \widehat{a}(n-k) e_n.$$

Le coefficient en e_j est donc $\widehat{a}(j-k)\mathbb{1}_{1 \leq j \leq N}$. De l'autre côté, on a

$$a \Pi_N e_k = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \widehat{a}(n) e_n e_k \mathbb{1}_{1 \leq k \leq n} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \widehat{a}(n) e_{n+k} \mathbb{1}_{1 \leq k \leq n} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \widehat{a}(n-k) e_n \mathbb{1}_{1 \leq k \leq n}.$$

Le coefficient en e_j est donc $\widehat{a}_{j-k} \mathbb{1}_{1 \leq k \leq N}$. Ainsi, $([\Pi_N, a])_{k,j} = \widehat{a}(j-k)(\mathbb{1}_{1 \leq j \leq n} - \mathbb{1}_{1 \leq k \leq n})$. Explicitons la matrice de coefficient en $(i,j) \in \mathbb{Z}$ la quantité $(\mathbb{1}_{1 \leq j \leq n} - \mathbb{1}_{1 \leq k \leq n})$. C'est une matrice de taille infinie de la forme

$$\left(\begin{array}{cccc|ccccc|cccc}
\ddots & & \iddots & \iddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & & \iddots \\
 & \iddots & \iddots & 0 & -1 & \cdots & -1 & \cdots & -1 & 0 & \ddots & \ddots & \\
\iddots & \iddots & 0 & 0 & \vdots & \iddots & \vdots & \ddots & \vdots & 0 & 0 & \ddots & \ddots \\
\iddots & 0 & 0 & 0 & -1 & \cdots & -1 & \cdots & -1 & 0 & 0 & 0 & \ddots \\
\hline
\cdots & 1 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 1 & \cdots \\
\cdots & \vdots & \iddots & \vdots & \vdots & \ddots & & \iddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \cdots \\
\cdots & 1 & \cdots & 1 & 0 & & 0 & & 0 & 1 & \cdots & 1 & \cdots \\
\cdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \iddots & & \ddots & \vdots & \vdots & \iddots & \vdots & \cdots \\
\cdots & 1 & \cdots & 1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 1 & \cdots & 1 & \cdots \\
\hline
\ddots & 0 & 0 & 0 & -1 & \cdots & -1 & \cdots & -1 & 0 & 0 & 0 & \iddots \\
\ddots & \ddots & 0 & 0 & \vdots & \ddots & \vdots & \iddots & \vdots & 0 & 0 & \iddots & \iddots \\
 & \ddots & \ddots & 0 & -1 & \cdots & -1 & \cdots & -1 & 0 & \iddots & \iddots & \\
\iddots & & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \iddots & \iddots & & \ddots
\end{array}\right).$$

Avec ça, on peut déterminer la matrice de $[\Pi_N, a]$. On obtient

$$\left(\begin{array}{ccccc|ccccc|cccc}
 & \ddots & & \iddots & \iddots & \ddots & \ddots & & \iddots & & \ddots & \ddots & & \iddots \\
 & & \iddots & \iddots & 0 & -a_3 & \ddots & \ddots & & & 0 & \ddots & \ddots & \\
 & \iddots & \iddots & 0 & 0 & -a_2 & -a_3 & \ddots & \ddots & & 0 & 0 & \ddots & \ddots \\
 & \iddots & 0 & 0 & 0 & -a_1 & -a_2 & -a_3 & \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & \ddots \\
\hline
 & \ddots & a_{-3} & a_{-2} & a_{-1} & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \ddots & & & \\
\ddots & \ddots & a_{-3} & a_{-2} & & \vdots & \ddots & & \iddots & \vdots & \ddots & \ddots & & \iddots \\
 & \ddots & \ddots & a_{-3} & & 0 & & 0 & & 0 & a_3 & \ddots & \ddots & \\
\iddots & & \ddots & \ddots & & \vdots & \iddots & & \ddots & \vdots & a_2 & a_3 & \ddots & \ddots \\
 & & & \ddots & & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & a_1 & a_2 & a_3 & \ddots \\
\hline
 & \ddots & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & -a_{-3} & -a_{-2} & -a_{-1} & 0 & 0 & 0 & \iddots \\
 & \ddots & \ddots & 0 & 0 & & \ddots & \ddots & -a_{-3} & -a_{-2} & 0 & 0 & \iddots & \iddots \\
 & & \ddots & \ddots & 0 & & & \ddots & \ddots & -a_{-3} & 0 & \iddots & \iddots & \\
 & \iddots & & \ddots & \ddots & & \iddots & & \ddots & \ddots & \iddots & \iddots & & \ddots
\end{array}\right).$$

Ainsi, puisque $[\Pi_N, a]$ est antihermitienne $(\forall k \in \mathbb{N}, \overline{\widehat{a}(k)} = \widehat{a}(-k))$,

$$\mathrm{Tr}([\Pi_N, a]^2) = \mathrm{Tr}(-[\Pi_N, a][\Pi_N, a]^*) = 2 \sum_{\ell \in \mathbb{Z}^*} |a_\ell|^2 \min(|\ell|, N) \underset{N \to +\infty}{\uparrow} 2 \sum_{\ell \in \mathbb{Z}^*} |a_\ell|^2 |\ell|.$$

Ainsi,

$$\mathrm{Tr}([\Pi_N, a]^2) \leq 2 \sum_{\ell \in \mathbb{Z}^*} |a_\ell|^2 |\ell|.$$

4. Par le point 2, on a

$$\|[\Pi_n, a]\|_{\mathfrak{S}_1} \leq \sum_{i,j \in \mathbb{Z}} [\Pi_n, a]_{i,j} = 2 \sum_{\ell \in \mathbb{Z}^*} |a_\ell| \min(|\ell|, N) \underset{N \to +\infty}{\uparrow} 2 \sum_{\ell \in \mathbb{Z}^*} |a_\ell| |\ell|.$$

$\square$

1.4 log det

Nous avons nos ingrédients pour démontrer le théorème de Szegő.
Rappelons quelques notations.

Définition 8 (Exponentielle de matrice, logarithme de matrice)**.** Soit $M \in \mathcal{M}_N(\mathbb{C})$. On définit formellement

$$\exp(M) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{1}{n!} M^n$$

et

$$\log(I_N + M) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} M^n.$$

On admet qu'ainsi, $\forall M \in \mathcal{M}_N(\mathbb{C}), \exp(\log(I_N + M)) = I_N + M$.

Remarque 1. Remarquons que $\det(\exp(A)) = \exp(\operatorname{tr}(A))$. Pour $A = \log(1+M)$, on a $\log\det = \operatorname{tr}\log$.

Cela étant, soit $a : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ une fonction $\mathrm{L}^2([0,2\pi])$ paire. On suppose que $\|a\|_\infty < 1$ et $\sum_{\ell\in\mathbb{Z}^*} |a_\ell||\ell| < +\infty$.

1.4.1 Etape 1 : premier terme du développement asymptotique

On a :

$$\begin{aligned}
\log\det(I_N + T_N(a)) &= \operatorname{tr}(\log(I_N + \Pi_N a \Pi_N)) = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \operatorname{tr}((\Pi_N a \Pi_N)^n) \\
&= \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \operatorname{tr}(\Pi_N a^n \Pi_N) + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \underbrace{\operatorname{tr}((\Pi_N a \Pi_N)^n - \Pi_N a^n \Pi_N)}_{=:t_{n,N}} \\
&= \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \frac{N+1}{2\pi} \int_0^{2\pi} a^n + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} t_{n,N} \\
&= \frac{N+1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} a^n + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} t_{n,N} \qquad \text{car } \|a\|_\infty < 1 \\
&= (N+1) c_0(\log(1+a)) + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} t_{n,N}.
\end{aligned}$$

On va essayer de regarder le terme $t_{n,N}$. Pour cela, on note $a_k := \widehat{a}(k)$ pour tout $k \in \mathbb{Z}$.

1.4.2 Etape 2 : étudier le terme $t_{n,N}$

On fixe, sauf mention explicite du contraire, $N \in \mathbb{N}$ et $n \in \mathbb{N}^*$.

Proposition 3. Pour tout $k \in \mathbb{Z}$,

$$\widehat{a^n}(k) = \sum_{\ell_1,..,\ell_{n-1}\in\mathbb{Z}} a_{\ell_1} a_{\ell_2-\ell_1} \dots a_{\ell_{n-1}-\ell_{n-2}} a_{k-\ell_{n-1}}.$$

Démonstration. On procède par récurrence sur $n \in \mathbb{N}$.

$$\begin{aligned}
a^{n+1} &= \sum_{k\in\mathbb{Z}} \widehat{a^n}(k) e_k \sum_{k\in\mathbb{Z}} \hat{a}(k) e_k \\
&= \sum_{k\in\mathbb{Z}} \sum_{\ell_n\in\mathbb{Z}} \widehat{a^n}(\ell_n) \hat{a}(k-\ell_n) e_k \\
&= \sum_{k\in\mathbb{Z}} \sum_{\ell_1,..,l_n\in\mathbb{Z}} a_{\ell_1} a_{\ell_2-\ell_1} \dots a_{\ell_{n-1}-\ell_{n-2}} a_{\ell_n-\ell_{n-1}} a_{k-\ell_n} e_k \text{ (qui est de la forme attendue).}
\end{aligned}$$

□

Remarque 2. On peut réécrire la somme précédente en

$$\widehat{a^n}(k) = \sum_{\ell_1,\cdots,\ell_{n-1}\in\mathbb{Z}} a_{\ell_1} a_{\ell_2-\ell_1} \cdots a_{\ell_{n-1}-\ell_{n-2}} a_{k-\ell_{n-1}} = \sum_{\ell_1+\cdots+\ell_n=k} a_{\ell_1} a_{\ell_2} \cdots a_{\ell_n}.$$

Proposition 4. On a

$$\mathrm{tr}(\Pi_N a^n \Pi_N) = (N+1) \sum_{j_1 \dots j_{n-1} \in \mathbb{Z}} a_{j_1} \dots a_{j_{n-1}} a_{j_1 + \dots + j_{n-1}}.$$

Démonstration. Par la proposition précédente 3,

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}(\Pi_N a^n \Pi_N) &= (N+1)\widehat{a^n}(0) \\
&= (N+1) \sum_{\ell_1, \dots, \ell_{n-1} \in \mathbb{Z}} a_{\ell_1} a_{\ell_2 - \ell_1} \dots a_{\ell_{n-1} - \ell_{n-2}} a_{-\ell_{n-1}} \\
&= (N+1) \sum_{\ell_1, \dots, \ell_{n-1} \in \mathbb{Z}} a_{\ell_1} a_{\ell_2 - \ell_1} \dots a_{\ell_{n-1} - \ell_{n-2}} a_{\ell_{n-1}} \\
&= (N+1) \sum_{j_1 \dots j_{n-1} \in \mathbb{Z}} a_{j_1} \dots a_{j_{n-1}} a_{j_1 + \dots + j_{n-1}}.
\end{aligned}$$

□

Proposition 5.

$$\mathrm{tr}((\Pi_N a \Pi_N)^n) = \sum_{j_1, \dots, j_n \in \mathbb{Z}} \psi(j_1) \dots \psi(j_1 + \dots + j_n) a_{j_2} \dots a_{j_n} a_{j_2 + \dots + j_n}.$$

Démonstration. On calcule les coefficients $(\Pi_N a \Pi_N)^n$ par récurrence sur $n \in \mathbb{N}^*$. On veut montrer que

$$((\Pi_N a \Pi_N)^n)_{i,j} = \sum_{0 \leq \ell_1 \dots \ell_{n-1} \leq n} a_{i - \ell_{n-1}} a_{\ell_{n-1} - \ell_{n-2}} \dots a_{l_2 - \ell_1} a_{\ell_1 - j}.$$

Pour $n = 1$, c'est clair. Si l'assertion précédente est vérifiée pour un $n \in \mathbb{N}^*$ fixé, on a

$$\begin{aligned}
((\Pi_N a \Pi_N)^{n+1})_{i,j} &= \sum_{\ell_n = 0}^{n} a_{i - \ell_n} \sum_{0 \leq \ell_1 \dots \ell_{n-1} \leq n} a_{\ell_n - \ell_{n-1}} a_{\ell_{n-1} - \ell_{n-2}} \dots a_{\ell_2 - \ell_1} a_{\ell_1 - j} \\
&= \sum_{0 \leq \ell_1 \dots \ell_n \leq n} a_{i - \ell_n} a_{\ell_n - \ell_{n-1}} a_{\ell_{n-1} - \ell_{n-2}} \dots a_{\ell_2 - \ell_1} a_{\ell_1 - j} \text{ (c'est ce qu'on voulait).}
\end{aligned}$$

Ainsi, en introduisant artificiellement des indicatrices pour sommer sur $\mathbb{Z}$,

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}(\Pi_N a \Pi_N)^n) &= \sum_{0 \leq \ell_1 \dots \ell_n \leq n} a_{\ell_n - \ell_{n-1}} a_{\ell_{n-1} - \ell_{n-2}} \dots a_{l_2 - \ell_1} a_{\ell_1 - \ell_n} \\
&= \sum_{\ell_1 \dots \ell_n \in \mathbb{Z}} \psi(\ell_1) \dots \psi(\ell_n) a_{\ell_n - \ell_{n-1}} a_{\ell_{n-1} - \ell_{n-2}} \dots a_{l_2 - \ell_1} a_{\ell_1 - \ell_n} \\
&= \sum_{j_1 \dots j_n \in \mathbb{Z}} \psi(j_1) \dots \psi(j_1 + \dots + j_n) a_{j_2} \dots a_{j_n} a_{j_2 + \dots + j_n}
\end{aligned}$$

où on a posé $j_1 = \ell_1$ et $j_i = \ell_i - \ell_{i-1}$ pour $2 \leq i \leq n$. □

Proposition 6. [5] Si $j_2 \dots j_n$ sont fixés et $\sum_{j_1 \in \mathbb{Z}} \psi(j_1) \dots \psi(j_1 + \dots + j_n) \neq 0$ alors

$$\sum_{j_1 \in \mathbb{Z}} \psi(j_1) \dots \psi(j_1 + \dots + j_n) = (N+1) - (\max(0, j_2, \dots, j_2 + \dots + j_n) - (\min(0, j_2, \dots, j_2 + \dots + j_n)).$$

Démonstration. En tant qu'intersections d'intervalles d'entiers, l'ensemble des $j \in \mathbb{Z}$ tels que $\psi(j_1)\cdots\psi(j_1 + \cdots + j_n)$ est un intervalle d'entiers. Il suffit donc de calculer le cardinal de cet intervalle : s'il est de la forme $[\![a,b]\!]$, on a à calculer $b - a + 1$.

De manière générale, si on se donne une suite $(a_n)_n, (b_n)_n$, alors

$$\bigcap_{n=1}^{N} [a_n, b_n] = \left[\max_{1\leq n\leq N} a_n, \min_{1\leq n\leq N} b_n\right].$$

Ici, on a donc

$$\min_{1\leq p\leq k}\left(N - \sum_{i=2}^{p} j_i\right) = N - \max_{1\leq p\leq k}\sum_{i=2}^{p} j_i = b.$$

De même,

$$\max_{1\leq p\leq k}\left(0 - \sum_{i=2}^{p} j_i\right) = -\min_{1\leq p\leq k}\sum_{i=2}^{p} j_i = a.$$

Ainsi, on a donc

$$\sum_{j_1\in\mathbb{Z}} \psi(j_1)\ldots\psi(j_1+\cdots+j_n) = (N - \max(0, j_2, \ldots, j_2+\cdots+j_n)) - (-\min(0, j_2, \ldots, j_2+\cdots+j_n)) + 1$$

ce qui est la forme voulue. □

Remarque 3.

- Par hypothèse $\sum_{j_2\cdots j_k} (\max(0, j_2, \ldots, j_2+\cdots+j_n)|a_{j_2}|\ldots|a_{j_n}||a_{j_2+\ldots j_n}| < \infty$ et donc $\sum_{j_2\cdots j_n} (\max(0, j_2, \ldots, j_2+\cdots+j_n) - \min(0, j_2, \ldots, j_2+\cdots+j_n))a_{j_2}\ldots a_{j_n}a_{j_2+\ldots j_n}$ converge absolument.
- $$\sum_{j_2\cdots j_n} (\max(0, j_2, \ldots, j_2+\cdots+j_n)a_{j_2}\ldots a_{j_n}a_{j_2+\ldots j_n} = -\sum_{j_2\cdots j_k} \min(0, j_2, \ldots, j_2+\cdots+j_k)a_{j_2}\ldots a_{j_k}a_{j_2+\ldots j_n}$$
- On introduit $\sum^{*}$ qui désigne la somme sur les uplets $(j_2, \ldots j_n)$ tels que $\max(0, j_2, \ldots, j_2+\cdots+j_n) - (\min(0, j_2, \ldots, j_2+\cdots+j_n) \leq N$ et $\sum^{**}$ la somme sur l'ensemble complémentaire d'uplets.

Théorème 3. *[3]*

$$\mathrm{tr}((\Pi_N a\Pi_N)^n - \Pi_N a^n\Pi_N) = -2\underbrace{\sum_{\ell_1+\ell_2+\cdots+\ell_n=0} w_n(0, \ell_1, \cdots, \ell_n)\prod_{i=1}^{n} a_{\ell_i}}_{=:S} + o_{N\to+\infty}(1). \tag{2}$$

Démonstration. [5] On a :

$$\begin{aligned}
\mathrm{tr}((\Pi_N a\Pi_N)^n) &= \sum_{j_1,\ldots,j_n\in\mathbb{Z}} \psi(j_1)\ldots\psi(j_1+\cdots+j_n)a_{j_2}\ldots a_{j_n}a_{j_2+\cdots+j_n}\\
&= \sum_{j_2\cdots j_n\in\mathbb{Z}} a_{j_2}\ldots a_{j_n}a_{j_2+\cdots+j_n}\sum_{j_1\in\mathbb{Z}}\psi(j_1)\ldots\psi(j_1+\cdots+j_n)\\
&= \sum^{*} a_{j_2}\ldots a_{j_n}a_{j_2+\cdots+j_n}(N+1-(\max(0, j_2, \ldots, j_2+\cdots+j_n) - \min(0, j_2, \ldots, j_2+\cdots+j_n)).
\end{aligned}$$

Ainsi,

$$\mathrm{tr}((\Pi_N a \Pi_N)^n - \Pi_N a^n \Pi_N) = -2 \sum^{*} a_{j_2} \dots a_{j_n} a_{j_2+\dots+j_n} \max(0, j_2, \dots, j_2 + \dots + j_n) - (N+1) \sum^{**} a_{j_2} \dots a_{j_n} a_{j_2+\dots+j_n}.$$

On note

$$\sum^{*} a_{j_2} \dots a_{j_n} a_{j_2+\dots+j_n} \max(0, j_2, \dots, j_2 + \dots + j_n) =: S.$$

Pour la somme $**$, il faut remarquer que $** \subset \{(j_2, \dots, j_{n+1}) | \sum j_i = 0 \wedge \exists j_i \geq \frac{N}{n}\}$ (voir 6), on a donc

$$\begin{aligned} \left| \sum^{**} a_{j_2} \dots a_{j_n} a_{j_2+\dots+j_n} \right| &= \left| \sum_{j_2+\dots+j_{n+1}=0}^{**} a_{j_2} \dots a_{j_{n+1}} \right| \\ &\leq \sum_{|j_1| \geq \frac{N}{n}} |a_{j_1}| \left| \underbrace{\sum_{j_2+\dots+j_{n+1}=-j_1} a_{j_2} \dots a_{j_{n+1}}}_{c_{-j_1}(a^n)} \right| \\ &\leq \frac{n}{N} \|a\|_{\mathrm{L}^\infty}^{n-1} \sum_{|j_1| \geq \frac{N}{n}} |j_1| \; |a_{j_1}|. \end{aligned}$$

On a supposé que $\sum |j||a_j| < \infty$ donc le reste $\sum_{|j_1| \geq \frac{N}{n}} |j_1||a_{j_1}|$ tend vers 0 quand $N \to \infty$, d'où

$$(N+1) \sum^{**} a_{j_2} \dots a_{j_n} a_{j_2+\dots+j_n} = o_{N\to\infty}(1).$$

□

1.4.3 Démonstration du théorème de Szegő

Démonstration. On a obtenu précédemment

$$\log\det(I_N + T_N(a)) = (N+1) \int_0^{2\pi} \ln(1+a) + \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} t_{n,N}$$

avec $t_{n,N} = \mathrm{tr}((\Pi_N a \Pi_N)^n - \Pi_N a^n \Pi_N)$.

On a donc par le théorème 3

$$\mathrm{tr}((\Pi_N a \Pi_N)^n - \Pi_N a^n \Pi_N) = -2 \underbrace{\sum_{\ell_1+\ell_2+\dots+\ell_n=0} w_n(0, \ell_1, \cdots, \ell_n) \prod_{i=1}^n a_{\ell_i}}_{=:S} + o_{N\to+\infty}(1).$$

Etudions plus en détails S.

$$\begin{aligned}
S &= \sum_{\ell_1+\ell_2+\cdots+\ell_n=0} w_n(0,\ell_1,\cdots,\ell_n)\prod_{i=1}^n a_{\ell_i} \\
&= \sum_{\ell_1+\ell_2+\cdots+\ell_n=0} \sum_{k=1}^n \left(w_k(0,\ell_1,\cdots,\ell_k) - w_k(0,\ell_1,\cdots,\ell_{k-1})\right)\prod_{i=1}^n a_{\ell_i} \\
&= \sum_{\ell_1+\ell_2+\cdots+\ell_n=0} \sum_{k=1}^n \frac{1}{k}\sum_{\sigma\in C_k} \Big(w_k(0,\ell_{\sigma(1)},\cdots,\ell_{\sigma(k)}) - w_k(0,\ell_{\sigma(1)},\cdots,\ell_{\sigma(k-1)})\Big)\prod_{i=1}^n a_{\ell_i} \\
&\underset{D-H(\text{Prop } 2)}{=} \sum_{\ell_1+\ell_2+\cdots+\ell_n=0} \sum_{k=1}^n \frac{1}{k}\sum_{i=1}^k \ell_i \mathbb{1}\left(\sum_{i=1}^k \ell_i > 0\right)\prod_{i=1}^n a_{\ell_i} \\
&= \sum_{k=1}^n \frac{1}{k} \sum_{\ell_1+\ell_2+\cdots+\ell_n=0} \sum_{i=1}^k \ell_i \mathbb{1}\left(\sum_{i=1}^k \ell_i > 0\right)\prod_{i=1}^n a_{\ell_i} \\
&= \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^{+\infty} \frac{j}{k} \sum_{\substack{\ell_1+\cdots+\ell_k=j \\ q_1+\cdots+q_{n-k}=-j}} \prod_{i=1}^k a_{\ell_i}\prod_{i=1}^{n-k} a_{q_i} \\
&= \sum_{j=1}^{+\infty}\sum_{k=1}^n \frac{j}{k} c_j(a^k)c_{-j}(a^{n-k}).
\end{aligned}$$

En symétrisant la somme sur k,

$$\sum_{k=1}^n \frac{1}{k}c_j(a^k)c_{-j}(a^{n-k}) = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^n \frac{n}{k(n-k)}c_{-j}(a^k)c_j(a^{n-k}).$$

On obtient

$$\operatorname{tr}((\Pi_N a\Pi_N)^n - \Pi_N a^n \Pi_N) = -\sum_{j=1}^{+\infty}\sum_{k=1}^n \frac{nj}{k(n-k)}c_j(a^k)c_{-j}(a^{n-k}) + o_{N\to+\infty}(1).$$

Ainsi, par interversion limite-série,

$$\begin{aligned}
\sum_{n=1}^{+\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n}\operatorname{tr}((\Pi_N a\Pi_N)^n - \Pi_N a^n\Pi_N) &= -\sum_{n=1}^{+\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{n}\sum_{j=1}^{+\infty}\sum_{k=1}^n \frac{nj}{k(n-k)}c_j(a^k)c_{-j}(a^{n-k}) + o_{N\to+\infty}(1) \\
&= -\sum_{j=1}^{+\infty} j\sum_{n=1}^{+\infty}\frac{(-1)^{n+1}}{k(n-k)}\sum_{k=1}^n c_{-j}(a^{n-k})c_j(a^k) + o_{N\to+\infty}(1) \\
&= \sum_{j=1}^{+\infty} j\sum_{n=1}^{+\infty}\sum_{p+q=n}\frac{(-1)^{p+1}}{p}c_{-j}(a^p)\frac{(-1)^{q+1}}{q}c_j(a^q) + o_{N\to+\infty}(1) \\
&= \sum_{j=1}^{+\infty} jc_{-j}\left(\sum_{p=1}^{+\infty}\frac{(-1)^{p+1}}{p}a^p\right)c_j\left(\sum_{q=1}^{+\infty}\frac{(-1)^{q+1}}{q}a^q\right) + o_{N\to+\infty}(1) \\
&= \sum_{j=1}^{+\infty} jc_{-j}(\ln(1+a))c_j(\ln(1+a)) + o_{N\to+\infty}(1) \\
&= \sum_{j=1}^{+\infty} j\|c_j(\ln(1+a))\|^2 + o_{N\to+\infty}(1).
\end{aligned}$$

Finalement,

$$\boxed{\log\det(I_{N+1}+T_N(a)) = (N+1)c_0(\log(1+a)) + \sum_{n=0}^{\infty} n\|c_n(\log(1+a))\|^2 + o_{N\to\infty}(1).}$$

Justifions l'interversion limite-série. On peut montrer que $\|AB\|_{\mathfrak{S}_1} \leq \|A\|_{\mathfrak{S}_1}\|B\|_{\mathrm{L}^2}$ ([6] page 3, théorème 1.6). De fait, fixons $N \in \mathbb{N}$. Alors

$$\begin{aligned}\alpha_{n,N} := \|(\pi_N a \pi_N)^n - \pi_N a^n \pi_N\|_{\mathfrak{S}^1} &= \|\pi_N[\pi_N, a]a^{n-1}\pi_N + \pi_N a \pi_N(\pi_N a^{n-1}\pi_N - (\pi_N a \pi_N)^{n-1})\|_{\mathfrak{S}_1} \\ &\leq \|a\|_\infty^{n-1}\|[\pi_N, a]\|_{\mathfrak{S}_1} + \|a\|_\infty \alpha_{n-1,N}\end{aligned}$$

car $\|\pi_N\|_\infty = 1$. En posant $\beta_{n,N} = \dfrac{\alpha_{n,N}}{\|a\|_\infty^{n-1}}$, on a

$$\beta_{n,N} \leq \|[\pi_N, a]\|_{\mathfrak{S}^1} + \beta_{n-1,N}.$$

Ainsi, on en déduit que

$$\beta_{n,N} \leq (n-1)\|[\pi_N, a]\|_{\mathfrak{S}^1} + \underbrace{\beta_{1,N}}_{=0}.$$

Ainsi,

$$\alpha_{n,N} \leq (n-1)\|[\pi_N, a]\|_{\mathfrak{S}^1}\|a\|_\infty^{n-1} \leq \underbrace{2(n-1)\|a\|_{W^{1,1/2}}\|a\|_\infty^{n-1}}_{=\text{terme général d'une série convergente si } \|a\|_\infty < 1}.$$

D'où la convergence normale de la série.

□

2 Equation de Schrödinger discrète

2.1 Introduction

Le théorème de Szegő nous a montré que pour a une fonction L^2, on avait une asymptotique pour le log det des matrices de Toeplitz que l'on peut écrire avec $(\delta_{i,j} + (\phi_i|a\phi_j))_{1\leq i,j\leq N}$ où les ϕ_i sont les fonctions propres du laplacien (théorie de Fourier). On peut alors se demander s'il est possible de généraliser ce résultat pour d'autres opérateurs différentiels ; [1] ont montré un résultat similaire pour l'équation de Schrödinger :

$$(-N^{-2}\Delta + V)u = 0 \tag{3}$$

pour un potentiel V lisse. Dans cette partie, on étudie l'équation aux valeurs propres :

$$(H - \lambda)u = 0 \tag{4}$$

où $H(u)_n = V\left(\dfrac{n}{N}\right)u_n - u_{n+1} - u_{n-1} + 2u_n$ est l'opérateur discrétisé.

2.1.1 Un premier cas : un potentiel V constant

Supposons que V soit constant égal à $V_0 \in \mathbb{R}$. Fixons $\lambda \in \mathbb{R}$. On cherche alors u dans $\ell^2(\mathbb{Z})$ vecteur propre de H pour la valeur propre λ. On est alors amené à résoudre l'équation de récurrence

$$u_{n+1} + (\lambda - V_0 - 2)u_n + u_{n-1} = 0.$$

La théorie des suites récurrentes linéaires distingue trois cas : en notant $\Delta = (\lambda - V_0 - 2)^2 - 4 = (\lambda - V_0)(\lambda - V_0 - 4)$,

1. $\Delta < 0$ – régime oscillatoire – : les solutions sont des sinusoïdes de la forme $\alpha\cos(\delta n) + \beta\sin(\delta n)$
2. $\Delta > 0$ – régime exponentiel – : les solutions sont des exponentielles de la forme $ar^n + br^{-n}$.
3. $\Delta = 0$ – régime critique – : les solutions sont de la forme $(\lambda n + \mu)(\pm 1)^n$.

Mise à part la solution nulle, aucune de ces solutions n'est dans $\ell^2(\mathbb{Z})$ mais cette étude met en exergue la fluctuation des comportements des solutions de l'équation en fonction de la valeur prise par V et du λ choisi).

Pour V un potentiel constant par morceaux (par exemple $V = \mathbb{1}_{|x|>4}$), dans le cas continu, pour $\lambda = \dfrac{1}{2}$, on imagine une solution de la forme suivante :

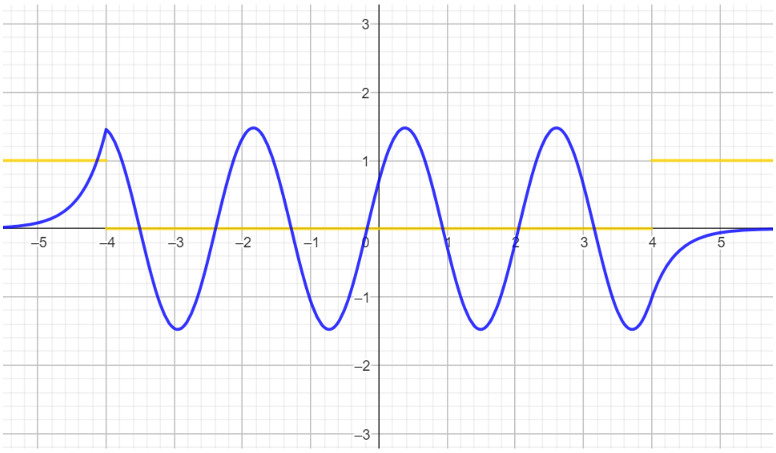

Figure 1 – Une « solution » (en bleu) pour $V = \mathbb{1}_{|x|>4}$ (en jaune) avec $\lambda = \dfrac{1}{2}$

Toutefois, le raccord ne semble pas régulier au point d'abscisse -4. Ainsi, à la question des différents comportement s'ajoute les problèmes de raccord.

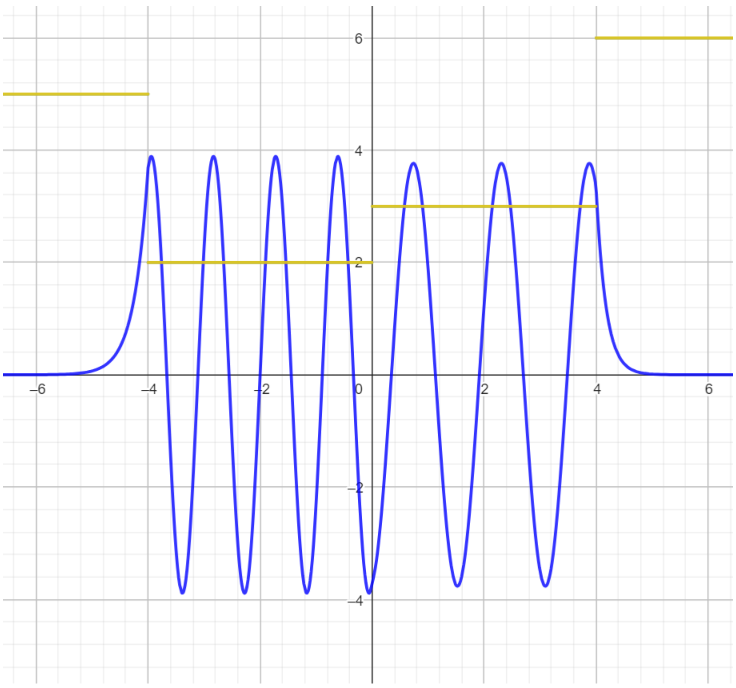

Figure 2 – Une solution (en bleu) pour V constant par morceaux (en jaune) avec $\lambda = \dfrac{1}{2}$

On s'attend alors à un comportement similaire dans le cas discret.

2.1.2 En vu du cas général

En prenant exemple sur le cas simple, on distingue deux zones dans le cas général. Une zone qu'on appellera « zone intérieure » qui correspond aux endroits où le discriminant de l'équation est strictement négatif, et la « zone extérieure » quand le discriminant est strictement positif. On traite ces deux cas séparément sans se poser la question du recollement dans les deux prochaines parties.

2.2 Méthode WKB : Etude dans la zone intérieure $\left(\left|2+V\left(\frac{n}{N}\right)-\lambda\right|<2\right)$

On cherche les fonctions propres de l'opérateur H défini par

$$H(u)_n = V\left(\frac{n}{N}\right)u_n - u_{n+1} - u_{n-1} + 2u_n.$$

Dans un premier temps on cherche des solutions approchées avec la méthode WKB [7] . On pose donc

$$u_n = \exp\left(iN\phi(\frac{n}{N})\right) a\left(\frac{n}{N}\right)$$

où a admet un développement de la forme $a\left(\frac{n}{N}\right) = \sum_{k=0}^{\infty} N^{-k} a_k\left(\frac{n}{N}\right)$. Les fonctions ϕ et a_k pour tout $k \in \mathbb{N}$ sont aussi régulières que nécessaire (C^∞ dans la démonstration qui va suivre).

On souhaite montrer que la condition $(H-\lambda)u = O(N^{-\infty})$ implique que $u \in \mathrm{Vect}(u_+, u_-)$ où u_+ u_- sont des fonctions dont on peut connaître les termes d'ordre k pour tout $k \in \mathbb{N}$. Autrement dit, les solutions approchées de l'équation aux valeurs propres dans la zone intérieure vivent dans un espace de dimension 2.

2.2.1 Calculs

Théorème 4. *Soit V un potentiel C^∞. On pose $u_n = \exp\left(iN\phi(\frac{n}{N})\right) a\left(\frac{n}{N}\right)$ où ϕ est C^∞ et a est définie ci-dessus. On suppose que $(H-\lambda)u = O_{N\to+\infty}(N^{-\infty})$. Alors il existe une famille d'opérateurs $(D_i)_{i\in\mathbb{N}}$ telle que*

$$(H-\lambda)ue^{-iN\phi(\frac{n}{N})} = D_1(a_0,\phi) + \frac{1}{N}\left(D_1(a_1,\phi) + D_2(a_0,\phi)\right) + \frac{1}{N^2}\left(D_1(a_2,\phi) + D_2(a_1,\phi) + D_3(a_0,\phi)\right) + \dots.$$

Plus généralement, le terme d'ordre N^{-k} vaut $\sum_{i=0}^{k} D_{i+1}(a_{k-i},\phi)$. u_n est appelée « solution approchée à l'asympotique WKB » de l'équation $(H-\lambda)u = 0$.

Démonstration. On montre comment le calcul se déroule pour obtenir une précision d'ordre N^{-2}, le cas plus général consistant à pousser les développements limités à des ordres plus élevés. On va donc utiliser les approximations suivantes :

$$\exp\left(iN\phi\left(\frac{n+1}{N}\right)\right) = e^{iN\phi(\frac{n}{N})}e^{i\phi'(\frac{n}{N})}\left(1 + iN^{-1}\phi^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right) + iN^{-2}\left[\phi^{(3)}\left(\frac{n}{N}\right) - \frac{1}{2}\phi^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right)^2\right] + O(N^{-3})\right),$$

$$\exp\left(iN\phi\left(\frac{n-1}{N}\right)\right) = e^{iN\phi(\frac{n}{N})}e^{-i\phi'(\frac{n}{N})}\left(1 + iN^{-1}\phi^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right) - iN^{-2}\left[\phi^{(3)}\left(\frac{n}{N}\right) - \frac{1}{2}\phi^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right)^2\right] + O(N^{-3})\right),$$

$$a\left(\frac{n+1}{N}\right) = a_0\left(\frac{n}{N}\right) + N^{-1}\left[a_0'\left(\frac{n}{N}\right) + a_1\left(\frac{n}{N})\right)\right] + N^{-2}\left[a_0^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right) + a_1'\left(\frac{n}{N}\right) + a_2\left(\frac{n}{N}\right)\right] + O(N^{-3}),$$

$$a\left(\frac{n-1}{N}\right) = a_0\left(\frac{n}{N}\right) + N^{-1}\left[-a_0'\left(\frac{n}{N}\right) + a_1\left(\frac{n}{N})\right)\right] + N^{-2}\left[a_0^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right) - a_1'\left(\frac{n}{N}\right) + a_2\left(\frac{n}{N}\right)\right] + O(N^{-3}).$$

Cela nous donne :

$$\begin{aligned}(H-\lambda)u &= \left(2+V\left(\frac{n}{N}\right)-\lambda\right)u_n - u_{n+1} - u_{n-1}\\ &= \left(2+V\left(\frac{n}{N}\right)-\lambda\right)e^{iN\phi(\frac{n}{N})}a\left(\frac{n}{N}\right) - e^{iN\phi(\frac{n+1}{N})}a\left(\frac{n+1}{N}\right) - e^{iN\phi(\frac{n-1}{N})}a\left(\frac{n-1}{N}\right).\end{aligned}$$

On se rend alors compte qu'en factorisant par $e^{iN\phi(\frac{n}{N})}$, on obtient

$$(H-\lambda)ue^{-iN\phi(\frac{n}{N})} = \underbrace{a_0\left(\frac{n}{N}\right)\left(2+V\left(\frac{n}{N}\right)-\lambda-e^{i\phi'(\frac{n}{N})}-e^{-i\phi'(\frac{n}{N})}\right)}_{=:D_1(a_0,\phi)}$$

$$+N^{-1}\left(D_1(a_1,\phi)\underbrace{-e^{i\phi'(\frac{n}{N})}\left(ia_0\left(\frac{n}{N}\right)\phi^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right)+a_0'\left(\frac{n}{N}\right)\right)-e^{-i\phi'(\frac{n}{N})}\left(ia_0\left(\frac{n}{N}\right)\phi^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right)-a_0'\left(\frac{n}{N}\right)\right)}_{=:D_2(a_0,\phi)}\right)$$

$$+N^{-2}\left(D_1(a_2,\phi)+D_2(a_1,\phi)+D_3(a_0,\phi)\right))+O(N^{-3})$$

où

$$\begin{aligned}D_3(a_0,\phi) = &-e^{i\phi'(\frac{n}{N})}\left(a_0^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right)+ia_0'\left(\frac{n}{N}\right)\phi^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right)+a_0\left(\frac{n}{N}\right)\left[i\phi^{(3)}\left(\frac{n}{N}\right)-\frac{1}{2}\phi^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right)^2\right]\right)\\ &-e^{-i\phi'(\frac{n}{N})}\left(a_0^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right)-ia_0'\left(\frac{n}{N}\right)\phi^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right)+a_0\left(\frac{n}{N}\right)\left[-i\phi^{(3)}\left(\frac{n}{N}\right)-\frac{1}{2}\phi^{(2)}\left(\frac{n}{N}\right)^2\right]\right).\end{aligned}$$

□

Remarque 4. L'opérateur D_k est linéaire en a et ne fait intervenir que des dérivées d'ordre au plus k en ϕ et $k-1$ en a. Les équations de transport qui apparaissent admettent donc une solution.

2.2.2 Description de l'espace des solutions approchées

Corollaire 1. Soit u_n la solution à l'asympotique WKB obtenue dans la proposition précédente, alors

$$\phi = \pm\int^t \arccos\left(\frac{2+V(\frac{\cdot}{N})-\lambda}{2}\right)$$

.

Démonstration. Comme $(H-\lambda)u = O(N^{-\infty})$, on a en particulier $D_1(a_0,\phi)=0$ i.e :

$$2+V\left(\frac{n}{N}\right)-\lambda = 2\cos\left(\phi'\left(\frac{n}{N}\right)\right) \tag{5}$$

Dans la zone intérieure, on a $\left|2+V\left(\frac{n}{N}\right)-\lambda\right| < 2$ d'où :

$$\phi'\left(\frac{n}{N}\right) = \arccos\left(\frac{2+V(\frac{n}{N})-\lambda}{2}\right).$$

L'équation 5 sur ϕ' nous laisse *a priori* le choix pour ϕ. En effet, si ϕ est un candidat qui vérifie l'équation, alors les fonctions $\widetilde{\phi} : x \mapsto \pm\phi(x)+2k\pi x+c$ (où $k\in\mathbb{Z}$ et c est une constante) sont aussi solutions. On observe que, dans ce cas, en considérant

$$v_n := \exp\left(iN\widetilde{\phi}\left(\frac{n}{N}\right)\right)a\left(\frac{n}{N}\right) = \exp\left(iNc\right)\exp\left(\pm iN\phi\left(\frac{n}{N}\right)\right)a\left(\frac{n}{N}\right)$$

une autre solution, v_n reste dans l'espace engendré par $(e^{iN\phi}a; e^{-iN\phi}a)$. On a donc 2 types de choix pour ϕ : une primitive de

$$x \mapsto \arccos\left(\frac{2+V(\frac{x}{N})-\lambda}{2}\right)$$

et son opposée. □

Corollaire 2. L'espace des solutions approchées à l'asymptotique WKB est de dimension 2.

Eléments de preuve. Une fois que $\phi_\pm$ est fixé, on détermine complètement la fonction $a_\pm$ en résolvant successivement les équations $(H-\lambda)u = O(N^{-k})$ qui font intervenir nos opérateurs D_k. On obtient finalement deux solutions u_+, u_- qui forment une base de l'espace des solutions approchées.

□

2.2.3 Propagation de l'erreur

On aimerait montrer que nos solutions approchées n'explosent pas dans la zone intérieure. On veut aussi savoir si des suites qui résolvent l'équation à $O(N^{-k})$ près sont effectivement proches des vraies solutions de l'équation.

Proposition 7. Soit u une solution de $(H-\lambda)u = 0$. Alors il existe des constantes C, K telles que pour tout n dans la zone intérieure, on ait :

$$\left\| \begin{pmatrix} u_n \\ u_{n+1} \end{pmatrix} \right\| \leq Ce^K \left\| \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \end{pmatrix} \right\| \tag{6}$$

.

Démonstration. L'équation $(H-\lambda)u = 0$ se réécrit :

$$\begin{pmatrix} u_n \\ u_{n+1} \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 2+\lambda+V(\frac{n}{N}) \end{pmatrix}}_{A_{\alpha_n}} \begin{pmatrix} u_{n-1} \\ u_n \end{pmatrix}.$$

On cherche donc à contrôler $\left|\left|\left| \prod A_k \right|\right|\right|$. On peut voir que

$$A_{\alpha_k} = P_{\alpha_k} \begin{pmatrix} e^{i\theta_k} & 0 \\ 0 & e^{-i\theta_k} \end{pmatrix} P_{\alpha_k}^{-1}$$

où P_{α_k} est composé des vecteurs propres de A_{α_k}, à savoir :

$$u_k^{(1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\alpha_k + \sqrt{\alpha_k^2+4}) \\ 1 \end{pmatrix} \; ; \; u_k^{(2)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(\alpha_k - \sqrt{\alpha_k^2+4}) \\ 1 \end{pmatrix}.$$

L'application $\alpha \mapsto P_\alpha$ est donc continue. Si on se place sur $[a,b]$ dans la zone intérieure, d'après l'inégalité de Taylor-Lagrange, on peut trouver $K > 0$ tel que $\left|\left|\left| P_{\alpha_k} P_{\alpha_{k+1}}^{-1} \right|\right|\right| \leq 1 + \dfrac{K}{N}$ uniformément en k, d'où

$$\begin{aligned} \left\| \begin{pmatrix} u_n \\ u_{n+1} \end{pmatrix} \right\| &\leq \prod_{k=\lfloor Na \rfloor}^{\lfloor Nb \rfloor} |||A_{\alpha_k}||| \left\| \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \end{pmatrix} \right\| \\ &\leq Ce^K \left\| \begin{pmatrix} u_0 \\ u_1 \end{pmatrix} \right\|. \end{aligned}$$

□

Au début de cette sous-partie nous avons déterminé des solutions approchées à un ordre quelconque, on aimerait faire le lien suivant : si v est "presque solution" de $(H-\lambda)u = 0$ alors à quel point v est-elle proche d'une solution exacte ? On essaie de répondre à cette question.

Corollaire 3. Si v vérifie $(H-\lambda)v = O(N^{-k})$ pour un certain $k \in \mathbb{N}$ et u vérifiant $(H-\lambda)u = 0$ alors $v - u = O(N^{-k-1})$ dans la zone intérieure. Par conséquent, v est bornée là où u l'est.

Eléments de preuve. De façon plus générale si $(H-\lambda)w = (r_n)$, on a le schéma suivant :

$$\begin{pmatrix} w_n \\ w_{n+1} \end{pmatrix} = \prod_{j=0}^{n-1} A_{\alpha_j} \begin{pmatrix} w_0 \\ w_1 \end{pmatrix} + \sum_{j=0}^{n-1} \left(\prod_{k=j}^{n-1} A_{\alpha_k} \right) r_j$$

On étudie ce schéma pour $w = u - v$ et $r_n = O(N^{-k})$ et on applique le résultat de la proposition précédente. La perte d'un ordre vient du fait qu'on accumule des erreurs à chaque étape.

□

Ceci conclut notre étude des solutions approchées à l'asymptotique WKB dans la zone intérieure.

2.3 Estimées d'Agmon [2]

2.3.1 Introduction via le cas continu

Soit $u \in \mathrm{L}^2(\mathbb{R}^d)$ vecteur propre de $-h^2\Delta + V$ pour la valeur propre λ. Dans le cas continu, l'objectif est d'avoir u_2^2 petit lorsque $V > \lambda$. Posons $w = e^{\varphi/h}u$ avec $\varphi \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^d)$ telle que $\varphi = 0$ pour $V < \lambda + \delta$ et $|\nabla\varphi|^2 \leq V - \lambda - \delta$ si $V \geq \lambda + \delta$ pour un certain $\delta > 0$.

$$\Delta(e^{\varphi/h}) = \mathrm{div}(\nabla e^{\varphi/h}) = \mathrm{div}\left(\frac{\nabla\varphi}{h} e^{\varphi/h}\right) = \left(\frac{1}{h}\mathrm{div}(\nabla\varphi) + \frac{1}{h^2}|\nabla\varphi|^2\right) e^{\varphi/h}.$$

De fait,

$$\Delta w = \Delta(e^{\varphi/h})u + 2\nabla e^{\varphi/h}\nabla u + e^{\varphi/h}\Delta u = e^{\varphi/h}\left(\frac{1}{h}\mathrm{div}(\nabla\varphi)u + \frac{1}{h^2}|\nabla\varphi|^2 u + 2\nabla\varphi\nabla u + \Delta u\right).$$

Ainsi,

$$h^2\int |\nabla w|^2 = -h^2\int \Delta w w = -\int e^{2\varphi/h}\left(h\Delta\varphi u^2 + |\nabla\varphi|^2 u^2 + h^2\Delta u.u + 2h\nabla\varphi\nabla u u\right) \tag{7}$$

On remplace alors $h^2\Delta u u = (V-\lambda)u^2$. De fait,

$$h^2\int |\nabla w|^2 = \int e^{2\varphi/h}(\lambda - V - h\Delta\varphi - |\nabla\varphi|^2)u^2 - 2h\underbrace{\int e^{2\varphi/h}\nabla\varphi\nabla u.u}_{=:I}. \tag{8}$$

Mais

$$I = \int e^{2\varphi/h}\nabla\varphi u\nabla u = -\int u\mathrm{div}(e^{2\varphi/h}\nabla\varphi u) = \underbrace{\int -ue^{2\varphi/h}\nabla\varphi\nabla u}_{-I} + \int -u^2\Delta\varphi e^{2\varphi/h} - 2\frac{|\nabla\varphi|^2}{h^2}e^{2\varphi/h}u^2 \tag{9}$$

Donc

$$-2hI = \int (h\Delta\varphi + 2|\nabla\varphi|^2)e^{2\varphi/h}u^2.$$

Ainsi,

$$h^2\int |\nabla w|^2 = \int e^{2\varphi/h}u^2(\lambda - V + |\nabla\varphi|^2) \tag{10}$$

que l'on écrit

$$h^2\int |\nabla w|^2 = \underbrace{\int_{V\leq\lambda+\delta} u^2(\lambda - V)}_{=:I_1} + \underbrace{\int_{V\geq\lambda+\delta} e^{2\varphi/h}u^2(\overbrace{\lambda - V + |\nabla\varphi|^2}^{\leq -\delta})}_{=:I_2} \geq 0.$$

Ainsi,

$$\int_{V\geq\lambda+\delta} e^{2\varphi/h}u^2(-\delta) \geq I_2 \geq -I_1 \geq -C\int_{V\leq\lambda+\delta} u^2.$$

De fait,

$$\|w\mathbb{1}_{V\geq\lambda+\delta}\|_2^2 = \int_{V\geq\lambda+\delta} e^{2\varphi/h}u^2 \leq \frac{C}{\delta}\|u\|_2^2.$$

Donc

$$\boxed{\|w\|_2 = \|w\mathbb{1}_{V\geq\lambda+\delta} + w\mathbb{1}_{V\leq\lambda+\delta}\|_2 \leq \|w\mathbb{1}_{V\geq\lambda+\delta}\|_2 + \|u\|_2 \leq \widetilde{C}\|u\|_2.}$$

Inspirons-nous de ce raisonnement pour obtenir nos estimées d'Agmon discrètes.

2.3.2 Analyse vectorielle discrète

On définit les applications suivantes :

$$\begin{array}{rccc} \nabla : & \ell(\mathbb{Z}) & \to & \ell(\mathbb{Z}+1/2) \\ & (u_n)_n & \mapsto & (\nabla u_n)_{n+\frac{1}{2}} := u_{n+1} - u_n \end{array} ;$$

$$\begin{array}{rccc} \mathrm{div} : & \ell(\mathbb{Z}+1/2) & \to & \ell(\mathbb{Z}) \\ & \left(v_{n+\frac{1}{2}}\right)_n & \mapsto & \left(\mathrm{div}(v_{n+\frac{1}{2}})\right)_n := v_{n+1} - v_n \end{array} ;$$

$$\begin{array}{rccc} \overline{\cdot} : & \ell(\mathbb{Z}) & \to & \ell(\mathbb{Z}+1/2) \\ & (u_n)_{n\in\mathbb{N}} & \mapsto & (\overline{u_n})_{n+\frac{1}{2}} := \dfrac{u_{n+1}+u_n}{2} \end{array} ;$$

$$\begin{array}{rccc} \underline{\cdot} : & \ell(\mathbb{Z}+1/2) & \to & \ell(\mathbb{Z}) \\ & \left(v_{n+\frac{1}{2}}\right)_n & \mapsto & \left(\underline{v_{n+\frac{1}{2}}}\right)_n := \dfrac{v_{n+\frac{1}{2}}+v_{n-\frac{1}{2}}}{2} \end{array} .$$

On a alors les résultats suivants :

1. $\Delta = \mathrm{div}\nabla$.
2. $\underline{\overline{u_n}} := \left(\underline{(\overline{u_n})_{n+\frac{1}{2}}}\right)_n = \frac{1}{4}\Delta u_n + u_n$.
3. $\left(\underline{(\nabla u_n)_{n+\frac{1}{2}}}\right)_n = \left(\mathrm{div}\,(\overline{u_n})_{n+\frac{1}{2}}\right)_n$.
4. $(\nabla(u_n v_n))_{n+\frac{1}{2}} = (\overline{u_n})_{n+\frac{1}{2}}(\nabla v_n)_{n+\frac{1}{2}} + (\overline{v_n})_{n+\frac{1}{2}}(\nabla u_n)_{n+\frac{1}{2}}$.
5. $\left(\mathrm{div}\left(u_{n+\frac{1}{2}}v_{n+\frac{1}{2}}\right)\right)_n = \left(\underline{u_{n+\frac{1}{2}}}\right)_n\left(\mathrm{div}v_{n+\frac{1}{2}}\right)_n + \left(\underline{v_{n+\frac{1}{2}}}\right)_n\left(\mathrm{div}u_{n+\frac{1}{2}}\right)_n$.
6. $\Delta(u_n v_n) = \underline{\overline{u_n}}\Delta v_n + 2\left((\mathrm{div}(\overline{u_n})_{n+\frac{1}{2}}\right)_n\left(\mathrm{div}(\overline{v_n})_{n+\frac{1}{2}}\right)_n + \underline{\overline{v_n}}\Delta u_n$.
7. $\displaystyle\sum_n u_n\Delta u_n = -\sum_n(\nabla u_n)^2$.
8. $\displaystyle\sum_n u_{n+\frac{1}{2}}(\nabla v_n)_{n+\frac{1}{2}} = -\sum(\mathrm{div}u_{n+\frac{1}{2}})_n v_n$.
9. $\displaystyle\sum_n u_n\underline{v_n} = \sum_n \overline{u_n}v_n$.
10. $\overline{uv} = \overline{u}\ \overline{v} + \frac{1}{4}\nabla u\nabla v$.

Observation 2. Bien que l'identité 6 est sensiblement proche de l'identité usuelle dans le cas continu, un terme résiduel apparait du fait de la discrétisation. Avec l'identité 2, on obtient en fait

$$\Delta(u_n v_n) = u_n \Delta v_n + 2\left((\mathrm{div}(\overline{u_n})_{n+\frac{1}{2}}\right)_n \left(\mathrm{div}(\overline{v_n})_{n+\frac{1}{2}}\right)_n + v_n \Delta u_n + \frac{1}{2}\Delta u_n \Delta v_n.$$

Ce dernier terme résiduel est une des raisons pour laquelle le calcul qui suit semble davantage fastidieux.

2.3.3 Estimées d'Agmon discrètes

Le but de cette sous-section est de mener un calcul similaire à la sous-section 2.3.1 traitant le cas continu – on se place en une dimension –. En particulier, nous attendons des résultats similiaires aux équations 8 et 10. On obtient dans le cas discret les propositions suivantes.

Proposition 8. Soit φ de classe $\mathcal{C}^3$ sur $\mathbb{R}$. Soit $(u_n)_n$ solution de l'équation $(-\Delta + V)u = \lambda u$. Alors

$$\sum_n w_n \Delta w_n = \sum_n e^2(a(V-\lambda) + L)u^2 + 2\sum_n e^2 b \underline{\nabla} \underline{u} u. \tag{11}$$

avec

$$e = \exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right) \quad ; \quad X = \varphi'\left(\frac{n}{N}\right);$$

$$L = 2\left(\cosh\left(X\right)\right) - 1) + \frac{\varphi''(n/N)}{N}\cosh(X)) + O\left(\frac{1}{N^2}\right);$$

$$a = \frac{L}{2} + 1 = \cosh\left(X\right)\left(1 + \frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right) + O\left(\frac{1}{N^2}\right).$$

Proposition 9. On conserve les notations de la proposition précédente. Alors

$$\sum w_n \Delta w_n = \sum e^2\left(a(V-\lambda) + L - C\right)u^2 \tag{12}$$

avec

$$C = \sinh(2X)\sinh(X) + \frac{\varphi''(n/N)}{N}\left(\frac{3}{2}\sinh(2X)\sinh(X) + \cosh(2X)\cosh(X)\right) + O\left(\frac{1}{N^2}\right).$$

Démonstration. (de la proposition 8). Soit $n, N \in \mathbb{N}^*$. On considère φ de classe $\mathcal{C}^3$. Par la formule de Taylor-Lagrange, on a

$$\varphi\left(\frac{n+1}{N}\right) = \varphi\left(\frac{n}{N}\right) + \frac{1}{N}\varphi'\left(\frac{n}{N}\right) + \frac{1}{2N^2}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right) + O\left(\frac{1}{N^3}\right).$$

Ainsi,

$$\begin{aligned}
\exp\left(N\varphi\left(\frac{n+1}{N}\right)\right) &= \exp\left[N\varphi\left(\frac{n}{N}\right) + \varphi'\left(\frac{n}{N}\right) + \frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right) + O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right] \\
&= \exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right)\exp\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\exp\left[\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right) + O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right] \\
&= \exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right)\exp\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left(1 + \frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right) + O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right) \\
&= \exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left[\exp\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left(1 + \frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right) + O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right].
\end{aligned}$$

On a donc

$$\exp\left(N\varphi\left(\frac{n+1}{N}\right)\right) = \exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left[\exp\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left(1 + \frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right) + O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right] \tag{13}$$

et un même calcul donne

$$\exp\left(N\varphi\left(\frac{n-1}{N}\right)\right) = \exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left[\exp\left(-\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left(1+\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right]. \tag{14}$$

Avec 13, on obtient alors

$$\nabla\exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right) = \exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left[\exp\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left(1+\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right)-1+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right] \tag{15}$$

On utilise la formule $\Delta(u) = u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}$ pour obtenir

$$\Delta\exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right) = \exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left[\underbrace{\left\{\exp\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)+\exp\left(-\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\right\}}_{=2\cosh(\varphi'(n/N))}\left(1+\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right)-2+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right]$$
$$= \exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left(2\left(\cosh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)-1\right)+\frac{\cosh(\varphi'(n/N))}{N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right).$$

Ainsi,

$$\Delta\exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right) = \exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right)\underbrace{\left(2\left(\cosh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)-1\right)+\frac{\cosh(\varphi'(n/N))}{N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right)}_{=:L}. \tag{16}$$

En notant $e = \exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right)$, on obtient alors

$$\begin{aligned}
\Delta w_n &= \Delta(eu)\\
&= \overline{e}\Delta u + 2\underline{\nabla e}\ \underline{\nabla u_n} + \overline{u}\Delta e\\
&= \left(\frac{1}{4}\Delta e + e\right)\Delta u + 2\underline{\nabla e}\ \underline{\nabla u_n} + u\Delta e + \frac{1}{4}\Delta u\Delta e\\
&= \frac{1}{2}\Delta e\Delta u + e\Delta u + u\Delta e + 2\underline{\nabla e}\ \underline{\nabla u}
\end{aligned}$$

où l'on a utilisé la formule $\overline{u} = \frac{1}{4}\Delta u + u$. Remplaçons. On a

$$\begin{aligned}
\Delta w_n &= \frac{1}{2}\Delta e\Delta u + e\Delta u + u\Delta e + 2\underline{\nabla e}\ \underline{\nabla u}\\
&= \frac{1}{2}eL\Delta u + e\Delta u + ueL + 2\underline{\nabla e}\ \underline{\nabla u}
\end{aligned}$$

On a alors

$$\frac{L}{2}+1 = \cosh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left(1+\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right) =: a$$

et

$$\underline{\nabla(e)} = \frac{e_{n+1}-e_{n-1}}{2} = e\underbrace{\sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left(1+\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)}_{=:b}.$$

Ainsi,

$$\Delta w = e(a\Delta u + Lu + 2b\underline{\nabla u}). \tag{17}$$

Ainsi,

$$\boxed{\sum_n w_n \Delta w_n = \sum_n e^2(au\Delta u + 2b\underline{\nabla u}u + Lu^2) = \sum_n e^2(a(V-\lambda)+L)u^2 + 2\sum_n e^2 b\underline{\nabla u}u. \qquad (18)}$$

□

La preuve de la porposition 9 repose essentiellement à regarder de plus près la deuxième somme de la proposition précédente.

Démonstration. (de la proposition 9) On conserve les notations précédentes. On a

$$\sum_n e^2 b\underline{\nabla u}u = \sum_n e^2 bu\mathrm{div}(\overline{u}) = -\sum_n \overline{u}\nabla(e^2 bu) \tag{19}$$

où la deuxième somme vient de la sommation par parties : on a dérivé la suite e^2bu qui est dans $\ell(\mathbb{Z})$ – ce qui donne $\nabla(e^2bu)$ dans $\ell(\mathbb{Z}+1/2)$ – et intégré $\mathrm{div}(\overline{u})$ qui est dans $\ell(\mathbb{Z})$ – ce qui donne $\overline{u}$ dans $\ell(\mathbb{Z}+1/2)$ –.

On a, par la formule de dérivée d'un produit,

$$\nabla(e^2bu) = \overline{e^2b}\nabla u + \overline{u}\nabla(e^2b). \tag{20}$$

Ainsi, en utilisant la relation précédente, puis $\overline{e^2a}\ \overline{u} = \overline{e^2bu} - \frac{1}{4}\nabla(e^2b)\nabla u$, puis $\sum u_n \underline{v_{n+1/2}} = \sum \overline{u_n} v_{n+1/2}$, on a

$$\begin{aligned}
\sum_n \overline{u}\nabla(e^2bu) &= \sum_n \overline{u}\ \overline{u}\nabla(e^2b) + \sum_n \overline{u}\ \overline{e^2b}\nabla u && (21)\\
&= \sum_n \overline{u}\ \overline{u}\nabla(e^2b) + \sum_n \overline{ue^2b}\nabla u + \frac{1}{4}\sum_n (\nabla u)^2\nabla(e^2b) && (22)\\
&= \sum_n \overline{u}\ \overline{u}\nabla(e^2b) + \sum_n ue^2b\underline{\nabla u} + \frac{1}{4}\sum_n (\nabla u)^2\nabla(e^2b) && (23)
\end{aligned}$$

On retrouve notre fameuse « deuxième somme » et donc,

$$2\sum_n e^2b\underline{\nabla u}u = -\sum_n \overline{u}\ \overline{u}\nabla(e^2b) - \frac{1}{4}\sum_n (\nabla u)^2\nabla(e^2b) = -\sum_n \underbrace{\left(\overline{u}^2 + \frac{1}{4}(\nabla u)^2\right)}_{=:\overline{u^2}}\nabla(e^2b) = -\sum_n u^2\underline{\nabla(e^2b)}. \tag{24}$$

En injectant dans l'équation 11, on obtient alors

$$\sum_n w_n\Delta w_n = \sum_n e^2(a(V-\lambda)+L)u^2 - \sum_n u^2\underline{\nabla(e^2b)}. \tag{25}$$

On cherche donc à calculer

$$\underline{\nabla(e^2b)} = \frac{(e^2b)_{n+1} - (e^2b)_{n-1}}{2}.$$

$$\begin{aligned}
(e^2)_{n+1} &= \exp\left(2N\varphi\left(\frac{n+1}{N}\right)\right)\\
&= \exp\left(2N\varphi\left(\frac{n}{N}\right) + 2\varphi'\left(\frac{n}{N}\right) + \frac{1}{N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right) + O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right)\\
&= e^2\left(\exp\left(2\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left(1 + \frac{1}{N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right) + O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right).
\end{aligned}$$

Un même calcul donne

$$(e^2)_{n-1} = e^2\left(\exp\left(-2\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left(1 + \frac{1}{N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right) + O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right).$$

Ensuite,

$$\begin{aligned}
b_{n+1} &= \sinh\left(\varphi'\left(\frac{n+1}{N}\right)\right)\left(1+\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n+1}{N}\right)\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\\
&= \sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)+\frac{1}{N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left(1+\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\\
&= \left[\sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)+\frac{1}{N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\cosh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\right]\left(1+\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\\
&= \sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)+\frac{\varphi''(n/N)}{N}\left[\frac{1}{2}\sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)+\cosh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\right]+O\left(\frac{1}{N^2}\right)
\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
b_{n-1} &= \sinh\left(\varphi'\left(\frac{n-1}{N}\right)\right)\left(1+\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n-1}{N}\right)\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\\
&= \sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)-\frac{1}{N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left(1+\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\\
&= \left[\sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)-\frac{1}{N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\cosh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\right]\left(1+\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\\
&= \sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)+\frac{\varphi''(n/N)}{N}\left[\frac{1}{2}\sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)-\cosh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\right]+O\left(\frac{1}{N^2}\right)
\end{aligned}$$

Ainsi,

$$(e^2b)_{n+1} = e^2\left(\exp\left(2\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left\{\sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)+\frac{\varphi''(n/N)}{N}\left[\frac{3}{2}\sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)+\cosh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\right]\right\}+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right)$$

et

$$(e^2b)_{n-1} = e^2\left(\exp\left(-2\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\left\{\sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)+\frac{\varphi''(n/N)}{N}\left[\frac{3}{2}\sinh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)-\cosh\left(\varphi'\left(\frac{n}{N}\right)\right)\right]\right\}+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right)$$

On obtient donc

$$\underline{\nabla(e^2b)} \underset{X=\varphi'(n/N)}{=} e^2\underbrace{\left(\sinh(2X)\sinh(X)+\frac{\varphi''(n/N)}{N}\left(\frac{3}{2}\sinh(2X)\sinh(X)+\cosh(2X)\cosh(X)\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)\right)}_{=:C}.$$

Ainsi,

$$\sum w_n\Delta w_n = \sum e^2\left(a(V-\lambda)+L-C\right)u^2 \tag{26}$$

avec

$$e = \exp\left(N\varphi\left(\frac{n}{N}\right)\right) \qquad X = \varphi'\left(\frac{n}{N}\right)$$

$$L = 2\left(\cosh\left(X\right)\right)-1)+\frac{\varphi''(n/N)}{N}\cosh(X))+O\left(\frac{1}{N^2}\right)$$

$$a = \frac{L}{2}+1 = \cosh\left(X\right)\left(1+\frac{1}{2N}\varphi''\left(\frac{n}{N}\right)\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)$$

$$C = \sinh(2X)\sinh(X)+\frac{\varphi''(n/N)}{N}\left(\frac{3}{2}\sinh(2X)\sinh(X)+\cosh(2X)\cosh(X)\right)+O\left(\frac{1}{N^2}\right)$$

□

On souhaite que $\|u\|_{\ell^2}$ soit petit lorsqu'on est dans la zone non-autorisée, à savoir $V > \lambda$ ou $V < \lambda - 4$. Au vu de l'équation 12 et la ressemblance avec l'équation 10, la conclusion se rapproche.

3 Qu'aurions-nous fait de plus si nous avions un temps infini ?

Comme expliqué en introduction, nous avons manqué de temps pour conclure la seconde partie. Les estimées d'Agmon discrètes obtenues précédemment pourront donner un critère sur φ afin d'obtenir un contôle exponentiel de u, solution dans la zone non-autorisée. Enfin, il faudrait donc en premier lieu traiter la question du recollement entre zone intérieure et extérieure afin de déterminer complètement les fonctions propres.

Après cela, il reste encore beaucoup de possibilités à explorer : par exemple, on aurait pu s'intéresser aux applications du théorème de Szegö en probabilité dans l'étude du spectre de matrices unitaires aléatoires, ou encore expliciter son lien avec les processus ponctuels déterminantaux.

Références

[1] Alix Deleporte and Gaultier Lambert. Universality for free fermions and the local weyl law for semiclassical schrödinger operators, 2021.

[2] Alix Deleporte and Gaultier Lambert. Central limit theorem for smooth statistics of one-dimensional free fermions, 2023.

[3] V. Guillemin and K. Okikiolu. Spectral asymptotics of toeplitz operators on zoll manifolds. Journal of Functional Analysis, 146(2) :496–516, 1997.

[4] Kurt Johansson. On fluctuations of eigenvalues of random Hermitian matrices. Duke Mathematical Journal, 91(1) :151 – 204, 1998.

[5] M. Kac. Toeplitz matrices, translation kernels and a related problem in probability theory. Duke Mathematical Journal, 21(3) :501 – 509, 1954.

[6] B. Simon. Trace ideals and their applications, 2nd edition. 2005.

[7] Paul Wilmott. A Note on the WKB Method for Difference Equations. IMA Journal of Applied Mathematics, 34(3) :295–302, 05 1985.