

Le splitting pour l'opérateur de Klein–Gordon: une approche heuristique et numérique

E. Servat

Abstract. Dans cet article on étudie la différence entre les deux premières valeurs propres, le splitting, d'un opérateur de Klein–Gordon semi-classique unidimensionnel, dans le cas d'un potentiel symétrique présentant un double puits. Dans le cas d'une petite barrière de potentiel, B. Helffer et B. Parisse ont obtenu des résultats analogues à ceux existant pour l'opérateur de Schrödinger. Dans le cas d'une grande barrière de potentiel, on obtient ici des estimations des transformées de Fourier des fonctions propres qui conduisent à une conjecture du splitting. Des calculs numériques viennent appuyer cette conjecture.

1 Introduction

Dans cet article, on s'intéresse au splitting pour un opérateur de Klein–Gordon semi-classique. Commençons par définir dans \mathbb{R}^n ces deux objets: l'opérateur de Klein–Gordon et le splitting. L'opérateur de Klein–Gordon semi-classique est donné par:

$$P = \sqrt{1 - h^2 \Delta} + V,$$

défini pour $u \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ par:

$$(1.1) \quad (Pu)(x, h) = \frac{1}{(2\pi h)^n} \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{i(x-y)\xi/h} p\left(\frac{x+y}{2}, \xi\right) u(y) dy d\xi,$$

où $p(x, \xi) = \sqrt{1 + \xi^2} + V(x)$ est le symbole de l'opérateur. On fait les hypothèses suivantes:

- (H1) $V \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ est à valeurs réelles;
- (H2) V a un minimum fini non dégénéré noté $E_0 - 1$, $\lim_{|x| \rightarrow \infty} V(x) = F_0 - 1 > E_0 - 1$;
- (H3) V est pair, atteint son minimum en $\pm x_0$ et la hessienne de V en $\pm x_0$ est définie positive.

L'opérateur P est alors semi-borné inférieurement, et on considère son extension de Friedrichs auto-adjointe, que l'on note encore P [7]. Sous ces hypothèses le spectre de P est discret dans l'intervalle $[E_0, F_0[$ [2]. Des constructions WKB au voisinage de $\pm x_0$ permettent de calculer les premières valeurs propres de P , comme dans le cas

Reçu par la rédaction le 14 septembre 2004; revu le 4 mars 2005.
 Ce travail a été partiellement financé par le programme européen HPRN-CT-2002-00277.
 Classification (AMS) par sujet: 35P05, 34L16, 34E05, 47A10, 47A70.
 ©Société mathématique du Canada 2007.

de l'opérateur de Schrödinger [2]. La symétrie du potentiel entraîne que les deux premières valeurs propres sont très proches l'une de l'autre et on appelle splitting leur différence.

Dans le cas d'un opérateur de Schrödinger, ce phénomène est bien compris [4, 6]. En particulier, lorsque h tend vers 0, le splitting décroît exponentiellement comme $e^{-S/h}$, où S est la distance d'Agmon entre les deux puits. La distance d'Agmon pour un opérateur de Schrödinger est associée à la métrique $d = (V - E_0)_+ dx^2$, où dx^2 est la mesure de Lebesgue.

Rappelons maintenant les résultats de B. Helffer et B. Parisse [5] dans le cas d'un opérateur de Klein–Gordon. Ils obtiennent une décroissance du splitting analogue à celle obtenue pour un opérateur de Schrödinger, où cette fois la distance d'Agmon est définie par la métrique

$$(1.2) \quad d = (1 - (E_0 - V)_+^2) dx^2.$$

Ils doivent cependant faire l'hypothèse supplémentaire :

(H) la géodésique minimale entre les puits $\pm x_0$ pour la distance d'Agmon se trouve dans la zone :

$$(1.3) \quad \mathcal{N} = \{x \in \mathbb{R}^n, V(x) < E_0\},$$

Ils montrent que le splitting $s(h)$ vérifie :

$$(1.4) \quad \lim_{h \rightarrow 0} \frac{s(h)e^{S/h}}{\sqrt{h}} = C_n(V),$$

où $S = d(-x_0, x_0)$ et $C_n(V)$ est une constante qui dépend de la dimension et du potentiel. Ce résultat s'appuie sur les techniques de séparation des puits développées pour l'opérateur de Schrödinger [6], ainsi que sur des majorations des fonctions propres. Si u_j est la fonction propre normalisée associée à la première valeur propre $\lambda(h)$ de l'opérateur à un puits $P + \beta_j$, où β_1 "bouche" le puits $\{x_0\}$: pour $\epsilon_0 > 0$, $\beta_1 \in C_0^\infty]x_0 - \epsilon_0, x_0 + \epsilon_0[$, $\beta_1 \geq 0$, $\beta_1(x_0) > 0$ et $\beta_2(x) = \beta_1(-x)$, le splitting est donné par le produit scalaire

$$(1.5) \quad s(h) = ((P - \lambda(h))u_2, u_1) + O(e^{S+\delta}), \delta > 0.$$

L'hypothèse (H) permet ensuite de remplacer les fonctions u_j par des approximations WKB explicites pour obtenir (1.4).

Ici, nous étudions le problème dans la zone $\mathcal{N}^c = \{x \in \mathbb{R}^n, V(x) \geq E_0\}$. Dans cette région, peu de résultats sont connus. Dans un cadre non semi-classique, *i.e.*, avec $h = 1$, R. Carmona, W. C. Master et B. Simon [1] étudient la décroissance des fonctions propres lorsque la variable x tend vers l'infini. Ils mettent en évidence deux taux de décroissance selon qu'on se trouve dans la région $\{V < E_0\}$ ou $\{V > E_0\}$ lorsque $|x|$ tend vers $+\infty$. De plus, s'agissant de la première fonction propre, ils montrent que leur résultat est optimal (en obtenant une minoration de cette fonction propre positive).

Dans un cadre semi-classique, B. Helffer et B. Parisse [5] obtiennent également ce changement de décroissance des fonctions propres. Si u est une fonction propre normalisée de P et si K est un compact, ils démontrent la majoration : pour $h_0 > 0$,

$$(1.6) \quad \forall \epsilon > 0, \exists C_\epsilon, \|e^{d/h}u\|_{L^2(K)} \leq C_\epsilon e^{\epsilon/h}, \quad h < h_0,$$

où la fonction $d(x) = \min(d(x, x_0), d(x, -x_0))$ désigne la distance d'Agmon aux puits. Cette distance change en effet de comportement selon qu'on se trouve dans \mathcal{N} ou dans \mathcal{N}^c , comme le montre la définition (1.2).

Cependant, on n'a pas ici les estimations précises qu'on obtenait dans \mathcal{N} pour la première fonction propre [5] : si $K \subset \subset \mathcal{N}$,

$$(1.7) \quad \exists C, \exists N, \forall h < h_0, \|e^{d/h}u\|_{L^2(K)} \leq Ch^{-N}.$$

Le problème vient du fait que la fonction $\xi \mapsto \sqrt{1 + \xi^2}$ n'est holomorphe que dans le domaine $\mathbb{C} \setminus \Delta$, où $\Delta = i] - \infty, -1] \cup i[1, +\infty[$. En particulier, cette fonction n'est pas holomorphe dans une bande plus large que

$$(1.8) \quad \mathcal{H} = \{\xi \in \mathbb{C}, |\Im \xi| < 1\}.$$

Cela empêche la déformation de contours d'intégration en dehors de \mathcal{H} et met en échec la méthode de [6] pour contrôler des décroissances exponentielles trop fortes. Ce même phénomène empêche la construction de solutions WKB standard au delà de \mathcal{N} si on veut utiliser les résultats existants pour l'opérateur de Schrödinger.

Venons en aux résultats de cet article. Le but est d'analyser le problème du splitting lorsque l'hypothèse **(H)** n'est plus vérifiée, dans le cas de la dimension un. Pour simplifier les notations et sans perte de généralité, on prend désormais $E_0 = 0$. A partir de la formule du splitting (1.5), on montre que son terme principal ne dépend que des transformées de Fourier des fonctions u_j au voisinage de $\pm i$: pour tout $\epsilon_0 > 0$, soit $\tilde{\chi} \in C_0^\infty(]-3\epsilon_0, 3\epsilon_0[)$, $\tilde{\chi} \equiv 1$ dans $[-2\epsilon_0, 2\epsilon_0]$ une fonction troncature près de 0, alors

Proposition 1.1 *Sous les hypothèses **(H1)** à **(H3)**, le splitting $s(h)$ de l'opérateur P est donné, modulo un facteur multiplicatif $1 + O(h^\infty)$, par*

$$(1.9) \quad s(h) = \frac{-i}{\pi} \int_{(\mathbb{R}+(1-\epsilon)i)_\xi \times (\mathbb{R}-(1-\epsilon)i)_\eta} \frac{q(\xi) - q(\eta)}{\xi + \eta} \widehat{u}_1(\xi, h) \widehat{u}_2(\eta, h) \tilde{\chi}(\Re \xi) \tilde{\chi}(\Re \eta) d\xi d\eta,$$

où $q(\xi) = \sqrt{1 + \xi^2}$, $\Re(z)$ désigne la partie réelle de z et $\epsilon > 0$ est petit.

Il faut alors remplacer $\widehat{u}_j(\cdot, h)$ par des approximations explicites. Pour cela, on fait l'hypothèse supplémentaire :

(H4) $V^{-1}(0) \cap [-x_0, x_0] = \{\pm b\}$, V est analytique au voisinage de $\pm b$ et $V'(b) \neq 0$.

Proposition 1.2 *Sous les hypothèses (H1) à (H4), il existe W_i un voisinage de i dans $\mathbb{C} \setminus \Delta$, il existe des fonctions holomorphes ψ_1 et b_n^1 , $n \geq 0$ définies dans W_i , tel que pour tout $\epsilon_1 > 0$ et tout $N \in \mathbb{N}$,*

$$(1.10) \quad \widehat{u}_1(\xi, h) = h^{-1/4} e^{i\psi_1(\xi)/h} \left(\sum_{n \geq 0}^N h^n b_n^1(\xi) + R_N^1(\xi, h) \right), \quad R_N^1(\xi, h) = O(h^{N+1}),$$

lorsque ξ est dans un voisinage de $i[1 - 2\epsilon_1, 1 - \epsilon_1[$ de taille $O(h^{1/2})$.

On a un résultat similaire pour u_2 en $-i$.

On ne peut pas remplacer directement \widehat{u}_j par les développements ci-dessus dans l'expression du splitting (1.9) car ces développements ne sont valables que dans un voisinage de $i[1 - 2\epsilon_1, 1 - \epsilon_1[$ de taille $O(h^{1/2})$. Un second problème vient de la singularité en $\pm i$ de ces développements. En effet, pour calculer le terme principal de $s(h)$ lorsque h tend vers 0, on prend $\epsilon = O(h)$ dans le contour d'intégration de (1.9). On doit alors contrôler la singularité en $\pm i$ des termes du développement WKB (1.10). Le manque d'analyticité du symbole de P empêche un contrôle suffisant des restes R_N^j . Pour passer outre ce problème, on définit le splitting formel comme suit :

Définition 1.3 On appelle splitting formel $s_F(h)$ la quantité donnée par la formule (1.9), où on remplace $\widehat{u}_j(\cdot, h)$ par les développements WKB (1.10) en omettant les restes.

On peut alors calculer et on obtient :

Théorème 1.4 *Si l'opérateur P vérifie les hypothèses (H1) à (H4), le splitting formel $s_F(h)$ vérifie*

$$(1.11) \quad \lim_{h \rightarrow 0} \frac{s_F(h) e^{S/h}}{h} = \frac{2(x_0 - b)V''(x_0)^{3/4} e^{-\sqrt{V''(x_0)}I}}{|V'(b)|(\pi)^{1/2} b^{3/2}} \Gamma(3/2),$$

où I est l'intégrale convergente

$$I = \int_{-x_0}^{-b} \left(\frac{V(y)}{\sqrt{1 - V^2(y)}} + \frac{1}{\sqrt{V''(-x_0)}(y + x_0)} \right) dy,$$

et $\Gamma(s) = \int_{\mathbb{R}^+} e^{-u} u^{s-1} du$ pour $\Re s > 0$.

Remarquons que la puissance de h obtenue ici n'est pas la même que celle obtenue sous l'hypothèse (H) comme le montre (1.4).

Le splitting formel (1.11) donnera le splitting réel si on démontre la conjecture :

Conjecture 1.5 *Si P vérifie les hypothèses (H1) à (H4), alors pour $N \geq 1$, le développement (1.10) est valable sur un voisinage indépendant de h de $i[1 - 2\epsilon_1, 1 - \epsilon_1[$, pour $\epsilon_1 > 0$. De plus, les restes $R_N^1(\cdot, h)$ sont holomorphes dans W_i et vérifient*

$$\forall N \geq 1, \exists C > 0, \forall \xi \in W_i, |R_N^1(\xi, h)| \leq C \frac{h^N}{|\xi - i|^{N-1/2}}.$$

Pour appuyer cette conjecture, on fait des calculs numériques du splitting et on les compare à la valeur théorique s_F . On considère la famille de potentiels :

$$(1.12) \quad V_C = -1 + C(1 - x^2)^2, \quad C > 1.$$

En conjuguant l'opérateur de Klein–Gordon obtenu avec ces potentiels par l'opérateur unitaire de transformation de Fourier, on ne change pas le spectre et on obtient un opérateur différentiel. On peut alors calculer son spectre [9]. On obtient des résultats concordant avec l'estimation du splitting formel (1.11), ce qui laisse penser que la conjecture 1.5 est vraie.

Cet article est organisé de la manière suivante. Dans la deuxième partie on étudie les transformées de Fourier \hat{u}_j des fonctions propres u_j pour obtenir la proposition 1.2. On étudie également la singularité des fonctions qui apparaissent dans le développement WKB des \hat{u}_j en $\pm i$. Dans la troisième partie on réécrit le splitting en faisant intervenir les \hat{u}_j (proposition 1.1) et on obtient le théorème 1.4. Enfin dans la dernière partie on s'intéresse à la famille de potentiels V_C , qui permettent de faire des calculs numériques. On verra que ces calculs concordent avec la valeur théorique (1.11). Un calcul de coefficients de normalisation des fonctions propres est donné dans l'appendice A.

2 Transformées de Fourier des fonctions u_j

Dans cette partie, on se concentre sur la fonction propre normalisée u_1 de l'opérateur à un puits $\{-x_0\}$. La symétrie du potentiel permettra ensuite d'obtenir les résultats pour u_2 .

On considère donc un opérateur de Klein–Gordon défini par (1.1) en dimension un et on fait les hypothèses **(H1)**, **(H2)**, ainsi que les hypothèses **(H3)**, et **(H4)** adaptées au cas d'un unique minimum de V . Quitte à ajouter une constante au potentiel et à faire une translation, on peut supposer que $E_0 = 0$, et que V atteint son minimum en 0. On suppose donc :

$$V(0) = -1, \quad V'(0) = 0, \quad V''(0) > 0,$$

$$V(x) > -1 \text{ si } x \neq 0 \text{ et } \lim_{|x| \rightarrow +\infty} V(x) > -1.$$

Dans cette partie, on fait une hypothèse supplémentaire :

(H4b) On a $\mathcal{N} = \{x, V(x) < 0\} =]a, b[, -\infty < a < 0 < b < +\infty$.

Cette hypothèse n'interviendra pas dans la suite. En effet, on pourra ajouter une fonction au potentiel et faire en sorte que cette hypothèse soit vérifiée sans pour autant modifier le terme principal du splitting.

On définit la transformée de Fourier semi-classique par

$$\mathcal{F}(u)(\xi, h) = \hat{u}(\xi, h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} e^{-ix\xi/h} u(x, h) dx.$$

Le résultat principal de cette partie est la proposition 1.2 donnée dans l'introduction.

Pour démontrer ce résultat, on construit une approximation WKB de u_1 dans $\mathcal{N} =]a, b[$. On montre ensuite qu'on peut utiliser cette approximation pour calculer \widehat{u}_1 et obtenir la proposition 1.2. On commence donc par le résultat suivant, déjà utilisé dans [5] :

Proposition 2.1

(i) Pour tout $\epsilon > 0$, il existe des réels $E_k, k \geq 1$ et des fonctions $a_k, k \geq 0$ dans $C_0^\infty([a + \epsilon/2, b - \epsilon/2])$ telles que $v_1^N(x, h)$ définie pour $N \in \mathbb{N}$ par

$$(2.1) \quad v_1^N(x, h) = h^{-1/4} e^{-d(x)/h} a^N(x, h), \quad a^N(x, h) = \sum_{n=0}^N h^n a_n(x)$$

vérifie

$$(2.2) \quad \forall x \in]a + \epsilon, b - \epsilon[, \quad h^{1/4} e^{d(x)/h} (P - \sum_{n=1}^N h^n E_n) v_1^N(x, h) = O(h^{N+1}),$$

où $d(x) = \left| \int_0^x (1 - (-V)_+^2)^{1/2} dt \right|$ est la distance d'Agmon au puits.

(ii) Si $\lambda(h)$ est la valeur propre associée à u_1 , on a de plus

$$(2.3) \quad \forall N \in \mathbb{N}, \exists C_N, \quad |\lambda(h) - \sum_{n=1}^N E_n h^n| \leq C_N h^{N+1},$$

$$(2.4) \quad \|e^{d/h}(u_1 - v_1)\|_{L^2([a+\epsilon, b-\epsilon])} \leq C_N h^N.$$

Preuve Soit $\epsilon > 0$. On adapte les constructions WKB de l'opérateur de Schrödinger [2] à l'opérateur de Klein–Gordon : on cherche des solutions de (2.2) $v_1(x, h)$ et $E(h)$ sous forme de séries formelles :

$$(2.5) \quad E(h) \sim \sum_{n \geq 1} h^n E_n, \quad v_1(x, h) = h^{-1/4} e^{-d(x)/h} a(x, h), \quad a(x, h) \sim \sum_{n \geq 0} h^n a_n(x).$$

La puissance 1/4 de h est issue de la normalisation de la solution comme le montre l'Appendice A.

Dans \mathcal{N} , $|d'(x)| < 1$ et donc $\Phi(x, y)$ définie par $\Phi(x, y)(x - y) = d(x) - d(y)$ vérifie $|\Phi(x, y)| < 1$ pour $x, y \in \mathcal{N}$. L'holomorphie de $\sqrt{1 + \xi^2}$ dans \mathcal{H} permet de déformer le contour d'intégration dans la définition de Pv_1 pour obtenir la série d'égalités :

$$\begin{aligned} Pv_1(x, h) &= \frac{h^{-1/4}}{2\pi h} \int_{\mathbb{R}^2} e^{i(x-y)\xi/h} p((x+y)/2, \xi) e^{-d(y)/h} a(y, h) dy d\xi \\ &= \frac{h^{-1/4}}{2\pi h} e^{-d(x)/h} \int_{\mathbb{R}_y \times (\mathbb{R} - i\Phi(x, x+y))_\xi} e^{-iy\xi/h} p(x+y/2, \xi + i\Phi(x, x+y)) \\ &\quad \times a(x+y, h) dy d\xi \\ &= \frac{h^{-1/4}}{2\pi h} e^{-d(x)/h} \int_{\mathbb{R}^2} e^{-iy\xi/h} p(x+y/2, \xi + i\Phi(x, x+y)) a(x+y, h) dy d\xi. \end{aligned}$$

La méthode de la phase stationnaire [2] donne maintenant

$$Pv_1(x, h) = h^{-1/4} e^{-d(x)/h} \left(\sum_{n=0}^N \frac{h^n}{i^n n!} f_n(x, h) + O(h^{N+1}) \right),$$

$$(2.6) \quad f_n(x, h) = \partial_y^n \partial_\xi^n [p(x + y/2, \xi + \Phi(x, x + y))a(x + y, h)]_{y=0, \xi=0}.$$

Ainsi, la fonction v_1 définie par (2.1) vérifie (2.2) si et seulement si les fonctions a_n satisfont dans $[a + \epsilon, b - \epsilon]$ les équations de transport suivantes :

$$\begin{aligned} (\mathcal{L} - E_1)a_0 &= 0, \\ (\mathcal{L} - E_1)a_k &= c_k + E_{k+1}a_0. \end{aligned}$$

où \mathcal{L} est l'opérateur différentiel d'ordre un :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \frac{d''(x)}{(1 - d'(x))^{3/2}} + \frac{d'(x)}{\sqrt{1 - d'(x)}} \frac{d}{dx},$$

et où c_k dépend de a_l , $0 \leq l \leq k - 1$ et E_m , $2 \leq m \leq k$ et est donné par (2.6).

Comme $d'(0) = 0$, l'opérateur \mathcal{L} est singulier en zéro. On procède alors exactement comme pour l'opérateur de Schrödinger dans le cas d'un puits ponctuel de potentiel non dégénéré [2] : on choisit les conditions initiales $a_0(0) \neq 0$. Cela impose la valeur de E_1 pour avoir une fonction régulière a_0 . On fixe également $a_k(0) = 0, k \geq 1$. L'équation de transport pour a_n prise en $x = 0$ donne E_{n+1} . On obtient en même temps des fonctions régulières a_n dans \mathcal{N} et des réels E_n . Il reste ensuite à modifier les fonctions a_n en les multipliant par une fonction troncature $C_0^\infty([a + \epsilon/2, b - \epsilon/2])$ valant 1 dans $[a + \epsilon, b - \epsilon]$. On calcule les premiers termes :

$$(2.7) \quad E_1 = \frac{\sqrt{V''(0)}}{2}, \quad a_0(x) = C \left(\frac{V^2(x)}{1 - V^2(x)} \right)^{1/4} e^{-E_1 k(x)}, \quad x \in \mathcal{N},$$

où

$$k(x) = \int_b^x \frac{V(y)}{\sqrt{1 - V^2(y)}} dy$$

et

$$(2.8) \quad C = a_0(0) \sqrt{b} V''(0)^{1/4} \exp \left(-E_1 \int_0^b \left(\frac{V(y)}{\sqrt{1 - V^2(y)}} + \frac{1}{\sqrt{V''(0)} y} \right) dy \right).$$

L'Appendice A donne de plus $a_0(0) = (\sqrt{V''(0)}/\pi)^{1/4}$.

On démontre maintenant (ii). L'estimation (2.3) est une conséquence classique de l'autoadjonction de P et de (2.2) [2]. D'autre part, dans [5], les auteurs considèrent l'opérateur conjugué

$$e^{(1-\epsilon)d/h} (P + \chi_\epsilon) e^{-(1-\epsilon)d/h},$$

où pour $\epsilon > 0$, $\chi_\epsilon(x) = \chi(x/\epsilon)$, $\chi \in C_0^\infty([-1, 1])$, $\chi(0) \neq 0$.

Ils montrent que cet opérateur est uniformément inversible (uniforme en $h < h_0$) et en déduisent les majorations des fonctions propres (1.6), (1.7) données dans l'introduction. La même méthode permet d'obtenir l'estimation (2.4) à partir de (2.2). ■

On démontre maintenant la proposition 1.2 qui donne l'expression de \widehat{u}_1 .

On écrit $u_1(x, h) = e^{-d(x)/h}g_1(x, h)$ pour une fonction g_1 majorée par $e^{\epsilon/h}$ ou h^{-N} selon la région où on se trouve, comme le montre (1.6) ou (1.7). On a, pour $\xi \in \mathbb{R}$

$$(2.9) \quad \widehat{u}_1(\xi, h) = \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} e^{-ix\xi/h} e^{-d(x)/h} g_1(x, h) dx.$$

Remarque 2.2 Lorsque $x \in \mathcal{N}^c =]a, b[^c$, $|d'(x)| = 1$. L'expression (2.9) ci-dessus montre donc que \widehat{u}_1 existe et est holomorphe dans $\mathcal{H} = \{\xi \in \mathbb{C} \text{ si } |\Im \xi| < 1\}$.

Pour $\epsilon_0 > 0$, la fonction \widehat{u}_1 est donc bien définie dans W un voisinage de $i[1 - 2\epsilon_0, 1 - \epsilon_0]$ de taille $O(h^{1/2})$. Etudions la phase de (2.9) :

$$\phi_\xi(x) = -ix\xi - d(x).$$

Si $\epsilon_0 > 0$ est assez petit, les hypothèses **(H4)** et **(H4b)** montrent que $\phi_\xi(x)$ a un unique point critique noté x_ξ , défini par

$$(2.10) \quad \forall \xi \in W, d'(x_\xi) = -i\xi.$$

En effet, d' admet un prolongement analytique inversible au voisinage de b par **(H4)**. Soit

$$(2.11) \quad \psi(\xi) = -x_\xi \xi + id(x_\xi).$$

La formule (2.10) montre que $\psi'(\xi) = -x_\xi$.

Pour $x \in \mathbb{R}$ et $\xi \in i[1 - 2\epsilon_0, 1 - \epsilon_0]$, la partie réelle de $\phi_\xi(x)$ a un unique maximum $-\Im \psi(\xi)$ en $x_\xi \in \mathbb{R}$. De plus, la continuité de $\xi \mapsto x_\xi$ donne l'existence de $\epsilon_1 > 0$ et $\epsilon_2 > 0$ tels que

$$\forall \xi \in i[1 - 2\epsilon_0, 1 - \epsilon_0], x_\xi \in [b - \epsilon_1/2, b - 3\epsilon_2/2].$$

On en déduit l'existence de $C_0 > 0$ tel que :

$$(2.12) \quad \forall \xi \in i[1 - 2\epsilon_0, 1 - \epsilon_0], \forall x \in \mathbb{R} \setminus [b - \epsilon_1, b - \epsilon_2], \Re \phi_\xi(x) \leq -\Im \psi(\xi) - C_0.$$

La continuité des fonctions $\xi \mapsto \phi_\xi(x)$ et $\xi \mapsto \psi(\xi)$ montre qu'on peut diminuer h et donc W pour avoir (2.12) sur tout W , avec $C_0/2$ au lieu de C_0 .

On introduit alors $\chi \in C_0^\infty([b - \epsilon_1, b - \epsilon_2])$, $\chi = 1$ dans $[b - \epsilon_1 + \epsilon_1/2, b - \epsilon_2 - \epsilon_2/2]$. Revenant à $\widehat{u}_1(\xi, h)$, on écrit maintenant, pour $\xi \in W$:

$$\begin{aligned} \widehat{u}_1(\xi, h) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} e^{-ix\xi/h} u_1(x, h) \chi(x) dx \\ &\quad + \frac{1}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} e^{-ix\xi/h} e^{-d(x)/h} g_1(x, h) (1 - \chi(x)) dx, \\ &= I_1 + I_2. \end{aligned}$$

L'estimation (2.12) de la partie réelle de la phase ainsi que celle de g_1 montrent que

$$\exists \delta > 0, \forall \xi \in W, |e^{-i\psi(\xi)/h} I_2| \leq C e^{-\delta/h}.$$

On étudie maintenant I_1 . Soit $\xi = \xi_0 + u \in W, \xi_0 \in i[1 - 2\epsilon_0, 1 - \epsilon_0], u \in \mathbb{R}, u = O(h^{1/2})$. Un développement limité de ψ en ξ_0 donne $C > 0$ tel que pour $x \in \mathbb{R}$,

$$(2.13) \quad \Re(-ix\xi - d(x) + \psi(\xi)) = \Re(-ix\xi_0 - d(x) + \psi(\xi_0)) + O(u^2) \leq Cu^2 = O(h).$$

Pour $N \geq 1$ fixé, on choisit v_1^N de sorte que (2.2) et (2.4) soient vérifiées dans $[a + \epsilon, b - \epsilon]$ pour $0 < \epsilon < \epsilon_2/2$. L'estimation (2.13) permet alors de remplacer χu_1 par v_1^N modulo $|e^{i\psi(\xi)/h}|O(h^N)$. Dans la suite, on néglige les termes de cet ordre, et donc on néglige également les termes d'ordre $|e^{i\psi(\xi)/h}|e^{-\delta/h}$. On obtient, pour $\xi \in W$:

$$(2.14) \quad \widehat{u}_1(\xi, h) = \frac{h^{-1/4}}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} e^{-ix\xi/h} e^{-d(x)/h} a^N(x, h) \chi(x) dx.$$

Définissons

$$g_\xi(x) = x(2 \int_0^1 d''(x_\xi + tx)(1-t) dt)^{1/2} \\ = \pm (2(i\psi(\xi) + i(x - \psi'(\xi))\xi + d(x + x_\xi)))^{1/2}.$$

On écrit

$$(2.15) \quad \widehat{u}_1(\xi, h) = \frac{h^{-1/4} e^{i\psi(\xi)/h}}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\mathbb{R}} e^{-g_\xi(x)^2/2h} a(x_\xi + x, h) \chi(x_\xi + x) dx.$$

Pour $\xi \in W$, on calcule $g'_\xi(0) = \sqrt{d''(x_\xi)} \neq 0$, et on note f_ξ l'inverse de g_ξ défini dans un petit voisinage de 0 dans \mathbb{C} . Soit

$$\Gamma = \{x \in \mathbb{C}, g_\xi(x) \in [-\delta, \delta]\}, \delta > 0.$$

Pour $\delta = \delta(\xi) > 0$ assez petit, on peut déformer le contour d'intégration dans (2.15) pour passer par Γ . On a

$$\widehat{u}_1(\xi, h) = \frac{h^{-1/4} e^{i\psi(\xi)/h}}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\Gamma} e^{-g_\xi(x)^2/2h} a(x_\xi + x, h) \chi(x_\xi + x) dx \\ + \frac{h^{-1/4} e^{i\psi(\xi)/h}}{\sqrt{2\pi h}} \int_{\Gamma^c} e^{-g_\xi(x)^2/2h} a(x_\xi + x, h) \chi(x_\xi + x) dx,$$

où $\Gamma \cup \Gamma^c$ est homotope à \mathbb{R} dans la région où l'intégrand de (2.15) est holomorphe. L'intégrale sur Γ^c est majorée par $O(e^{-\delta^2/4h})$ et on peut donc négliger ce terme.

Pour calculer l'intégrale sur Γ , on fait le changement de variable $y = g_\xi(x)$ pour obtenir

$$\forall \xi \in W, \widehat{u}_1(\xi, h) = \frac{h^{-1/4} e^{i\psi(\xi)/h}}{\sqrt{2\pi h}} \int_{-\delta}^{\delta} e^{-y^2/2h} a(x_\xi + f_\xi(y), h) \chi(x_\xi + f_\xi(y)) f'_\xi(y) dy.$$

On calcule alors

$$(2.16) \quad \widehat{u}_1(\xi, h) = h^{-1/4} e^{i\psi(\xi)/h} b(\xi, h), \quad b(\xi, h) \sim \sum_{n \geq 0} h^n b_n(\xi),$$

où pour tout $n \in \mathbb{N}$,

$$(2.17) \quad b_n(\xi) = \sum_{p+q=n} \frac{1}{2^p p!} \frac{\partial^{2p}}{\partial y^{2p}} [a_q(x_\xi + f_\xi(y)) f'_\xi(y)](y = 0).$$

Remarquons que modulo $|e^{i\psi(\xi)/h}|O(h^N)$, le calcul ci-dessus donne $\widehat{v}_1^N(\xi, h) = \widehat{u}_1(\xi, h)$, si $\xi \in W$.

Il reste maintenant à prolonger les fonctions ψ et b_n dans un voisinage de i dans $\mathbb{C} \setminus \Delta$. Avec les mêmes techniques de déformation de contours que dans le calcul de \widehat{u}_1 , l'estimation (2.2) dans $[b - \epsilon_1, b - \epsilon_2]$ implique pour la même fonction χ :

$$(2.18) \quad \forall \xi \in W, \mathcal{F}(\chi(P - E(h))v_1^N)(\xi, h) = h^{-1/4} e^{i\psi(\xi)/h} O(h^N).$$

D'autre part, on peut calculer $\mathcal{F}(\chi(P - E(h))v_1^N)$ en utilisant l'expression de \widehat{v}_1^N en fonction des b_n et la méthode de la phase stationnaire : modulo $|e^{i\psi(\xi)/h}|O(h^N)$, on obtient l'analogie de (2.6) pour $\xi \in W$:

$$\begin{aligned} \mathcal{F}(\chi P v_1^N)(\xi, h) &= \frac{1}{2\pi h} \int_{\mathbb{R}^2} e^{ix(\eta-\xi)/h} p(x, \eta) \widehat{v}_1^N(\eta, h) d\eta dx, \\ &= \frac{h^{-1/4}}{2\pi h} \int_{\mathbb{R}^2} e^{ix(\eta-\xi)/h} e^{i\psi(\eta)/h} p(x, \eta) \sum_{n=0}^N h^n b_n(\eta) d\eta dx, \\ &= h^{-1/4} e^{i\psi(\xi)/h} \sum_{n=0}^N h^n g_n(\xi), \end{aligned}$$

où

$$g_n(\xi) = \sum_{p+q=n} \frac{i^p}{p!} \partial_x^p \partial_\eta^q [p(x - \Psi(\xi, \xi + \eta), \xi + \eta) b_q(\xi + \eta)]_{\eta=0, x=0},$$

et $\Psi(\xi, \eta)(\xi - \eta) = \psi(\xi) - \psi(\eta)$. Avec (2.18) cela conduit à l'équation eiconale pour ψ :

$$(2.19) \quad V(-\psi'(\xi)) + \sqrt{1 + \xi^2} = 0,$$

ainsi qu'à des équations de transport dans W pour les b_n :

$$(2.20) \quad (\tilde{\mathcal{L}} - E_1)b_{n-1} = \beta_{n-1},$$

où

$$\tilde{\mathcal{L}} = \frac{1}{i} \left[\frac{1}{2} \psi''(\xi) V''(-\psi'(\xi)) - V'(-\psi'(\xi)) \frac{\partial}{\partial \xi} \right],$$

$\beta_0 = 0$, et

$$\beta_{n-1}(\xi) = \sum_{m=0}^{n-2} E_{n-m} b_m(\xi) - \frac{i^{n-m}}{(n-m)!} \partial_x^{n-m} \partial_\eta^{n-m} [p(x - \Psi(\xi, \xi + \eta, \xi)) b_m(\xi + \eta)] \Big|_{\substack{\eta=0 \\ x=0}}.$$

L'équation (2.19) donne un prolongement analytique de ψ dans W_i un voisinage de i dans $\mathbb{C} \setminus \Delta$.

Pour $\xi \in W_i$, $V'(-\psi'(\xi)) \neq 0$. Les équations de transport sont donc résolues dans W_i ce qui permet d'y prolonger les fonctions b_n . On a montré la proposition 1.2.

On termine cette partie en étudiant la singularité des fonctions b_n en i . Pour cela, on choisit ici la détermination de $\sqrt{\xi - i}$ définie dans W_i , c'est-à-dire qu'on prend maintenant $\text{Arg}(\xi - i) \in] - 3\pi/2, \pi/2[$. On a

Proposition 2.3 Les fonctions b_n définies dans (2.17) vérifient :

(I)

$$b_0(i) = \frac{\sqrt{b} V''(0)^{3/8} \exp\left(-E_1 \int_0^b \left(\frac{V(y)}{\sqrt{1-V^2(y)}} + \frac{1}{\sqrt{V''(0)y}}\right) dy\right)}{\pi^{1/4} \sqrt{V'(b)}} \neq 0.$$

(II) Pour $n \geq 0$, il existe des fonctions holomorphes dans W_i c_n , continues en i , telles que

$$(2.21) \quad b_0(\xi) - b_0(i) = c_0(\xi) \sqrt{\xi - i},$$

$$(2.22) \quad \forall n \geq 1, b_n(\xi) = \frac{c_n(\xi)}{(\xi - i)^{n-1/2}}.$$

Démonstration Cette proposition se démontre par une étude technique des équations de transport (2.20). Introduisons

Définition 2.4 Soit F l'ensemble des fonctions f qui s'écrivent :

$$f(\xi) = \tilde{f}(\xi, \sqrt{\xi - i}, -\psi'(\xi)),$$

pour une fonction \tilde{f} holomorphe au voisinage de $(i, 0, b)$.

L'ensemble F est une algèbre et on démontre par récurrence que

Lemme 2.5

$$(2.23) \quad \forall n \geq 1, \forall f \in F, \exists f_n \in F, f^{(n)}(\xi) = \frac{f_n(\xi)}{(\xi - i)^{n-1/2}}.$$

Si f est une fonction holomorphe au voisinage de b et si $k \in \mathbb{N}$, alors les termes $\partial_\eta^k(f(-\Psi(\xi, \xi + \eta)))(\eta = 0)$ s'expriment en fonction des dérivées de f et ψ . En particulier, le lemme 2.5 ci-dessus donne

$$(2.24) \quad \forall k \geq 1, \exists f_k \in F, \partial_\eta^k(f(-\Psi(\xi, \xi + \eta)))(\eta = 0) = \frac{f_k(\xi)}{(\xi - i)^{k-1/2}}.$$

On définit également les ensembles de fonctions suivants :

Définition 2.6 On note G_k l'espace vectoriel sur \mathbb{C} des fonctions f holomorphes dans W_i telles qu'il existe $k + 1$ suites complexes $(s_m^l)_m, 0 \leq l \leq k$ telles que

$$(2.25) \quad \forall n \in \mathbb{N}, f(\xi) = \sum_{m=0}^n s_m^0 (\xi - i)^{m/2} + \sum_{l=1}^k (\xi - i)^{l-1/2} (\ln(\xi - i))^l \sum_{m=0}^{n+1-2l} s_m^l (\xi - i)^{m/2} + g_n(\xi),$$

où $g_n(\xi)$ vérifie $g_n(\xi) = o(|\xi - i|^{n/2})$.

Cette définition donne facilement les résultats suivants :

Lemme 2.7

- (i) Si $f \in G_k$, alors $(\xi - i)f'(\xi) \in G_k$.
- (ii) $F \subset G_0$.
- (iii) $G_0 G_k \subset G_k$.
- (iv) Si $f \in G_0$, alors toute primitive de f est dans G_0 .
- (v) Si $f \in G_0$ et h est une fonction holomorphe dans un voisinage de $f(i)$, alors $h \circ f \in G_0$.

On montre un dernier lemme avant d'étudier les fonctions b_n :

Lemme 2.8

- (i) Soit g une fonction holomorphe dans W_i , qui tend vers 0 en i , et soit $\delta < 1$ tel que $i\delta \in W_i$. Alors

$$\forall p \in \mathbb{N}, f(\xi) = (\xi - i)^{p-1/2} \int_{i\delta}^\xi \frac{g(\eta)}{(\eta - i)^{p+1/2}} d\eta$$

est holomorphe dans W_i et tend vers 0 en i .

- (ii) Si $n \in \mathbb{N}^*$ et $g \in G_{n-1}$, alors

$$f(\xi) = (\xi - i)^{n-1/2} \int_{i\delta}^\xi \frac{g(\eta)}{(\eta - i)^{n+1/2}} d\eta \in G_n.$$

Preuve Montrons (i). W_i est un ouvert simplement connexe donc f est bien définie et holomorphe dans ce domaine. Montrons que cette fonction tend vers 0 en i .

Soit $\epsilon > 0$. L'intégrand est holomorphe dans $\mathbb{C} \setminus \Delta$. On choisit le contour d'intégration suivant : pour $\xi \in W_i$, soit C l'arc de cercle de centre i entre $i - i|\xi - i|$ et ξ . On a

$$f(\xi) = (\xi - i)^{n-1/2} \int_{i\delta}^{i-i|\xi-i|} \frac{g(\eta)}{(\eta - i)^{n+1/2}} d\eta + (\xi - i)^{n-1/2} \int_C \frac{g(\eta)}{(\eta - i)^{n+1/2}} d\eta, \\ = J_1 + J_2.$$

Par hypothèse, il existe $\epsilon' > 0$ tel que si $|\xi - i| < \epsilon'$, alors $|g(\xi)| < \epsilon$, d'où

$$|J_1| \leq \left| \int_{i\delta}^{i(1-\epsilon')} g(\eta)(\eta - i)^{-(n+1/2)} d\eta \right| + \left| \int_{i(1-\epsilon')}^{i-i|\xi-i|} g(\eta)(\eta - i)^{-(n+1/2)} d\eta \right| \\ \leq C_0 + C_1 \epsilon |\xi - i|^{-(n-1/2)},$$

où C_0 ne dépend que de ϵ' et n , et C_1 ne dépend que de n .

Majorons J_2 . Sur C on a $|g(\eta)| < \epsilon$ donc :

$$|J_2| \leq \epsilon \int_0^{|\pi/2 - \arg(\xi - i)|} |\xi - i|^{-(n+1/2)} |\xi - i| d\theta \leq \frac{2\pi\epsilon}{|\xi - i|^{(n-1/2)}}.$$

Finalement on obtient $\epsilon'' > 0$ tel que pour $|\xi - i| < \epsilon''$, $|f(\xi)| < C\epsilon$. On a montré (i).

On montre maintenant (ii). Soit $g \in G_{n-1}$ et $p \in \mathbb{N}$. Par définition de G_{n-1} , il existe une fonction $g_p(\xi) = o(|\xi - i|)^{p/2}$ et des suites $(s_m^l)_m$, $0 \leq l \leq n - 1$ telles que

$$g(\xi) = \sum_{m=0}^p s_m^0 (\xi - i)^{m/2} + \sum_{l=1}^{n-1} (\xi - i)^{l-1/2} (\ln(\xi - i))^l \sum_{m=0}^{p+1-2l} s_m^l (\xi - i)^{m/2} + g_p(\xi).$$

On veut montrer que

$$f(\xi) = (\xi - i)^{n-1/2} \int_{i\delta}^{\xi} \frac{g(\eta)}{(\eta - i)^{n+1/2}} d\eta \in G_n.$$

Il suffit donc d'étudier les termes :

$$A_m = (\xi - i)^{n-1/2} \int_{i\delta}^{\xi} \frac{(\eta - i)^{m/2}}{(\eta - i)^{n+1/2}} d\eta, \quad 0 \leq m \leq p, \\ A_{m,l} = (\xi - i)^{n-1/2} \int_{i\delta}^{\xi} \frac{(\ln(\eta - i))^l (\eta - i)^{l+m/2-1/2}}{(\eta - i)^{n+1/2}} d\eta, \quad \begin{matrix} 0 \leq m \leq p + 1 - 2l, \\ 1 \leq l \leq n - 1, \end{matrix} \\ B = (\xi - i)^{n-1/2} \int_{i\delta}^{\xi} \frac{g_p(\eta)}{(\eta - i)^{n+1/2}} d\eta.$$

On obtient, pour des constantes C dépendants de la borne inférieure des intégrales :

$$\begin{aligned}
 A_m &= \frac{(\xi - i)^{m/2}}{1 + m/2 - n} + C(\xi - i)^{n-1/2}, & \text{si } 1/2 + m/2 - n \neq 0, \\
 A_m &= (\xi - i)^{n-1}[(\xi - i)^{1/2} \ln(\xi - i)] + C(\xi - i)^{n-1/2}, & \text{si } 1/2 + m/2 - n = 0, \\
 A_{m,l} &= (\xi - i)^{l-1/2+m/2} \left(\sum_{k=0}^l \frac{(-1)^k (\ln(\xi - i))^{l-k} l(l-1) \dots (l-k+1)}{(l + m/2 - n)^{k+1}} \right) \\
 &\quad + C(\xi - i)^{n-1/2}, & \text{si } l + m/2 - n \neq 0, \\
 A_{m,l} &= \frac{(\xi - i)^{n-1/2} (\ln(\xi - i))^{l+1}}{l+1} + C(\xi - i)^{n-1/2}, & \text{si } l + m/2 - n = 0.
 \end{aligned}$$

Enfin, on écrit $g_p(\xi) = (\xi - i)^{p/2} k(\xi)$ pour une fonction k qui tend vers 0 en i . Alors

$$\begin{aligned}
 B &= (\xi - i)^{n-1/2} \int_{i\delta}^{\xi} \frac{(\eta - i)^{p/2} k(\eta)}{(\eta - i)^{n+1/2}} d\eta \\
 &= (\xi - i)^{p/2} \left[(\xi - i)^{n-p/2+1/2} \int_{i\delta}^{\xi} \frac{k(\eta)}{(\eta - i)^{n-p/2+1/2}} d\eta \right]
 \end{aligned}$$

Le point (i) de ce lemme implique que le terme entre crochets tend vers 0 quand ξ tend vers i et par suite $B = o(|\xi - i|)^{p/2}$. ■

On revient maintenant à la proposition 2.3 en démontrant le résultat suivant, qui est plus précis :

Proposition 2.9 Les fonctions b_n définies dans (2.17) vérifient :

(i) $b_0 \in G_0$, et

$$(2.26) \quad b_0(i) = 2\sqrt{\pi} \lim_{x \rightarrow b, x < b} a_0(x) |d''(x)|^{-1/2} \neq 0.$$

De plus, pour $j \geq 0$, il existe des fonctions $c_{0,j} \in G_0$ telles que

$$(2.27) \quad \forall j \geq 0, b_0^{(j)}(\xi) = \frac{c_{0,j}(\xi)}{(\xi - i)^{j-1/2}}.$$

(ii) Pour $j \geq 0, n \geq 1$, il existe des fonctions $c_{n,j} \in G_n$ telles que

$$(2.28) \quad b_n^{(j)}(\xi) = \frac{c_{n,j}(\xi)}{(\xi - i)^{n+j-1/2}}.$$

Preuve Montrons (i). L'équation de transport pour b_0 permet de calculer explicitement :

$$b_0(\xi) = C \exp\left(-iE_1 \int_i^\xi \frac{d\eta}{V'(-\psi'(\eta))}\right) (V'(\psi'(\xi)))^{-1/2},$$

où C est une constante donnée par les conditions initiales.

Comme $(V'(-\psi'(\xi)))^{-1/2} \in F$, et $(V'(-\psi'(\xi)))^{-1} \in F$, le lemme 2.7(ii), (iv) et (v) montre que $b_0 \in G_0$ et par suite on a l'existence de $c_{0,0} \in G_0$ comme dans (2.27), pour $j = 0$. D'autre part, l'expression de a_0 en fonction de b_0 (2.17) donne

$$\forall \xi \in W, b_0(\xi) = a_0(-\psi'(\xi)) |d''(-\psi'(\xi))|^{-1/2}.$$

Les deux membres de cette égalité se prolongent analytiquement pour $\xi \in W_i$ et en particulier

$$b_0(i) = \lim_{\xi \rightarrow i, \xi \in W_i} a_0(-\psi'(\xi)) |d''(-\psi'(\xi))|^{-1/2},$$

ce qui donne (2.26). Cette limite existe et est non nulle grâce à l'expression de a_0 (2.7). On a donc la première partie de (i).

On démontre maintenant que pour $n \geq 1$, il existe $e_{0,n} \in G_0$ tel que

$$(2.29) \quad b_0^{(n)}(\xi) = b_0(\xi) \frac{e_{0,n}(\xi)}{(\xi - i)^{n-1/2}}.$$

Grâce au lemme 2.7(iii) on aura alors $c_{0,n} = b_0(\xi)e_{0,n}(\xi) \in G_0$.

Pour $n = 1$, l'équation de transport pour b_0 conduit à :

$$(2.30) \quad b_0'(\xi) = \left[\frac{V''(-\psi'(\xi))}{2V'(-\psi'(\xi))} \frac{\xi}{\sqrt{1+\xi^2}} - i \frac{E_1}{V'(-\psi'(\xi))} \right] b_0(\xi).$$

Cela montre donc que

$$b_0'(\xi) = b_0(\xi) \frac{e_{0,1}(\xi)}{(\xi - i)^{1/2}},$$

où $e_{0,1} \in F$: $e_{0,1}(\xi) = \tilde{e}_{0,1}(\xi, \sqrt{\xi - i}, -\psi'(\xi))$ pour

$$\tilde{e}_{0,1}(x, y, z) = \frac{xV''(z)}{2V'(z)^2\sqrt{\xi + i}} - i \frac{E_1 y}{V'(z)}.$$

Supposons maintenant que la dérivée n ème de b_0 soit de la forme (2.29), pour $e_{0,n}(\xi) \in F$. L'expression des dérivées des fonctions appartenant à F (2.23) donne :

$$\begin{aligned} b_0^{(n+1)}(\xi) &= b_0'(\xi) \frac{e_{0,n}(\xi)}{(\xi - i)^{n-1/2}} + b_0(\xi) \frac{e_{0,n}'(\xi)}{(\xi - i)^{n-1/2}} - b_0(\xi) \frac{(n - 1/2)e_{0,n}(\xi)}{(\xi - i)^{n+1/2}} \\ &= b_0(\xi) \frac{e_{0,1}e_{0,n}(\xi)}{(\xi - i)^n} + b_0(\xi) \frac{d_{0,n}(\xi)}{(\xi - i)^n} - b_0(\xi) \frac{(n - 1/2)e_{0,n}(\xi)}{(\xi - i)^{n+1/2}} \end{aligned}$$

pour une fonction $d_{0,n} \in F$. Cela conclut la démonstration de (i) avec

$$e_{0,n+1}(\xi) = \sqrt{\xi - i}[e_{0,1}(\xi)e_{0,n}(\xi) + d_{0,n}(\xi)] - (n - 1/2)e_{0,n}(\xi) \in F \subset G_0.$$

Montrons (ii). La formule (2.24) donne

$$(2.31) \quad \forall k \geq 1, \exists f_k \in F, \partial_\eta^k(V(-\Psi(\xi, \xi + \eta)))(\eta = 0) = \frac{f_k(\xi)}{(\xi - i)^{k-1/2}}.$$

On va montrer par récurrence sur $n \geq 1$ l'existence de $e_{n,j} \in G_n$ tels que

$$b_n^{(j)}(\xi) = b_0(\xi) \frac{e_{n,j}(\xi)}{(\xi - i)^{n-1/2}}, \quad j \geq 0.$$

On aura la proposition avec $c_{n,j} = b_0 e_{n,j} \in G_n$.

Cherchons b_1 solution de l'équation de transport sous la forme $b_1 = b_0 g$. On obtient

$$-V'(-\psi'(\xi))g'(\xi) = \beta_1(\xi) = \frac{-i}{2} \partial_\eta^2(V''(-\Psi(\xi, \xi + \eta))b_0)(\eta = 0).$$

Grâce à (2.31), et à l'expression des dérivées de b_0 , il existe $f \in F$, et donc $f \in G_0$, tel que

$$\beta_1(\xi) = \frac{b_0(\xi)f(\xi)}{(\xi - i)^{3/2}}.$$

Pour $\delta < 1$ tel que $i\delta \in W_i$, et pour une constante C_1 qui dépend des conditions initiales (cf. (2.17)), on a

$$g(\xi) = C_1 + \int_{i\delta}^\xi \frac{h(\eta)}{(\eta - i)^{3/2}} d\eta, \quad h(\eta) = -f(\eta)/V'(-\psi'(\eta)) \in G_0.$$

Le lemme 2.8 implique alors que $e_{1,0}(\xi) = g(\xi)(\xi - i)^{1/2} \in G_1$, et

$$b_1(\xi) = b_0(\xi) \frac{e_{1,0}(\xi)}{(\xi - i)^{1/2}}.$$

Il suffit ensuite de dériver cette expression de $b_1(\xi)$: les résultats sur b_0 et b'_0 ainsi que le lemme 2.7(i) donnent par récurrence l'existence de fonctions $e_{1,k} \in G_1, k \geq 1$ tels que

$$b_1^{(k)}(\xi) = b_0(\xi) \frac{e_{1,k}(\xi)}{(\xi - i)^{k-1/2}}.$$

Si on suppose que cette écriture est valable pour tous les $b_k, 1 \leq k \leq n - 1$, alors l'équation de transport pour b_n s'écrit

$$(\tilde{\mathcal{L}} - E_1)b_n = \beta_n = b_0 \frac{f}{(\xi - i)^{n+1/2}}, \quad f \in G_{n-1}.$$

En cherchant b_n sous la forme $b_n = b_0 g$, on trouve une constante C_n telle que

$$g(\xi) = C_n + \int_{i\delta}^{\xi} \frac{f(\eta)}{(\eta - i)^{n+1/2}} d\eta.$$

Le lemme 2.8 montre que $e_{n,0}(\xi) = g(\xi)(\xi - i)^{n-1/2} \in G_n$ et on a

$$b_n(\xi) = b_0(\xi) \frac{e_{n,0}(\xi)}{(\xi - i)^{n-1/2}}.$$

Il suffit à nouveau de dériver l'expression obtenue pour b_n pour obtenir l'existence des fonctions $e_{n,k} \in G_n, k \geq 1$. La proposition est démontrée. ■

Ce dernier résultat donne la proposition 2.3 avec $c_n = c_{n,0}$.

On note désormais ψ_1, b_n^1 et c_n^1 les fonctions construites ci-dessus. Ces fonctions donnent une approximation de la transformée de Fourier de la fonction propre u_1 associée au problème à un puits, lorsqu'on a bouché le deuxième puits de sorte que l'hypothèse (H4b) soit vérifiée. Une étude similaire pour \hat{u}_2 en $-i$ donne l'existence de fonctions ψ_2, b_n^2, c_n^2 qui vérifient des résultats analogues à la proposition 1.2 et à la proposition 2.3 cette fois lorsque le premier puits est bouché.

On utilise maintenant ces fonctions pour calculer un splitting formel et obtenir le théorème 1.4.

3 Le splitting formel

On considère désormais un opérateur présentant deux puits ponctuels de potentiel en $\pm x_0$, et satisfaisant les hypothèses (H1) à (H4). On note $\pm b$ les points entre les deux puits pour lesquels le potentiel s'annule, $-x_0 < -b < 0 < b < x_0$.

Dans cette partie, on montre le théorème 1.4. La démonstration se fait en deux étapes : on obtient d'abord une expression du terme principal du splitting qui fait intervenir les transformées de Fourier des fonctions propres des problèmes à un puits \hat{u}_j au voisinage des points $\pm i$: c'est la proposition 1.1 de l'introduction. On remplace ensuite ces transformées de Fourier par les développements WKB obtenus dans la partie précédente pour calculer un splitting formel.

Définissons la fonction troncature : pour $\epsilon > 0, \tilde{\chi} \in C_0^\infty(\cdot) - 3\epsilon, 3\epsilon[\cdot], \tilde{\chi} \equiv 1$ dans $[-2\epsilon, 2\epsilon]$. On écrit un résultat un peu plus précis qui contient la proposition 1.1 :

Proposition 3.1 *Le splitting $s(h)$ est donné modulo un facteur multiplicatif $1 + O(h^\infty)$ par*

$$(3.1) \quad s(h) = \frac{-i}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{q(\tilde{\xi}) - q(\tilde{\eta})}{\xi + \eta} \hat{u}_1(\tilde{\xi}, h) \hat{u}_2(\tilde{\eta}, h) \tilde{\chi}(\xi) \tilde{\chi}(\eta) d\xi d\eta,$$

où $q(\xi) = \sqrt{1 + \xi^2}$. On a noté $\tilde{\xi} = i - i\frac{h}{2b} + \xi$, et $\tilde{\eta} = -i + i\frac{h}{2b} + \eta$ pour $\xi, \eta \in \mathbb{R}$.

Preuve Soit $\beta_1 \in C^\infty(\mathbb{R})$ une fonction positive bouchant le puits $\{x_0\}$ et tel que $V + \beta_1$ satisfait l'hypothèse **(H4b)**. Pour des constantes $\alpha_1 > 0, 0 < \alpha_2 < x_0$, on choisit β_1 tel que son support soit inclus dans $] -\infty, -x_0 - \alpha_1] \cup [\alpha_2, +\infty[$. Soit $\beta_2(x) = \beta_1(-x)$. En suivant la démonstration de [5] basée sur les estimations (1.6), on a la formule du splitting :

$$s = 2w + O(e^{-(S+\epsilon_0)/h}), \quad w = ((P - \lambda)u_2, u_1), \quad \epsilon_0 > 0,$$

où $\lambda = \lambda(h)$ est la première valeur propre de $P + \beta_1$, ainsi que de $P + \beta_2$ par symétrie, et $S = d(-x_0, x_0)$ est la distance d'Agmon entre les deux puits. On a

$$\begin{aligned} (P - \lambda)u_1(y, h) &= -\beta_1(y)u_1(y, h) = 0 \quad \text{pour } y \in [-x_0 - \alpha_1, \alpha_2] \\ (P - \lambda)u_2(y, h) &= -\beta_2(y)u_2(y, h) = 0 \quad \text{pour } y \in [-\alpha_2, x_0 + \alpha_1]. \end{aligned}$$

Si $x \in [-\alpha_2, \alpha_2]$, on a modulo $O(e^{-(S+\epsilon_0)/h})$, quitte à diminuer $\epsilon_0 > 0$:

$$\begin{aligned} w &= \int_{\mathbb{R}} ((P - \lambda)u_2)(y, h)u_1(y, h) dy \\ &= \int_{-\infty}^x ((P - \lambda)u_2)(y, h)u_1(y, h) dy \\ &= \int_{-\infty}^x \left[((P - \lambda)u_2)(y, h)u_1(y, h) - ((P - \lambda)u_1)(y, h)u_2(y, h) \right] dy \\ &= \frac{1}{2\pi h} \int_{-\infty}^x \left[\int_{\mathbb{R}^2} e^{iy(\xi+\eta)/h} (q(\xi) - q(\eta)) \widehat{u}_1(\xi, h)\widehat{u}_2(\eta, h) d\xi d\eta \right] dy. \end{aligned}$$

On choisit $x = 0 \in [-\alpha_2, \alpha_2]$ et on intègre en y pour trouver :

$$(3.2) \quad w = \frac{h}{i} \frac{1}{2\pi h} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{q(\xi) - q(\eta)}{\xi + \eta} \widehat{u}_1(\xi, h)\widehat{u}_2(\eta, h) d\xi d\eta.$$

Remarque 3.2 En dimension plus grande que un, la fonction $\frac{q(\xi)-q(\eta)}{\xi+\eta}$ n'est plus régulière, et on ne peut plus utiliser cette formule. B. Helffer et B. Parisse résolvent ce problème dans [5].

L'intégrand dans w est holomorphe dans $\mathcal{H}_\xi \times \mathcal{H}_\eta$ (cf. Remarque 2.2). On déforme le contour d'intégration comme suit : pour $|\alpha| < 1$ et $R > 0$, on intègre sur $(\Gamma_R^+)_\xi \times (\Gamma_R^-)_\eta$, où

$$\Gamma_R^\pm :=] -\infty, -R] \cup [-R, -R \pm i\alpha] \cup [-R \pm i\alpha, R \pm i\alpha] \cup [R \pm i\alpha, R] \cup [R, +\infty[.$$

Etudions le segment $[R + i\alpha, R]$: soit

$$t = \int_{[R+i\alpha, R]_\xi \times \mathbb{R}_\eta} \frac{q(\xi) - q(\eta)}{\xi + \eta} \widehat{u}_1(\xi, h)\widehat{u}_2(\eta, h) d\xi d\eta.$$

Alors

$$\begin{aligned}
 t &= - \int_{[0,\alpha]_\xi \times \mathbb{R}_\eta} \frac{q(R+iu) - q(\eta)}{R+iu+\eta} \widehat{u}_1(R+iu, h) \widehat{u}_2(\eta, h) i \, dud\eta \\
 &= - \int_{[0,\alpha]_\xi \times \mathbb{R}_\eta \times \mathbb{R}_y} \frac{q(R+iu) - q(\eta)}{R+iu+\eta} e^{-iy(R+iu)/h} u_1(y, h) \widehat{u}_2(\eta, h) i \, dydud\eta \\
 &= - \int_{[0,\alpha]_\xi \times \mathbb{R}_\eta \times \mathbb{R}_y} \frac{q(R+iu) - q(\eta)}{R+iu+\eta} e^{-iy(R+iu)/h} \frac{hu'_1(y, h)}{i(R+iu)} \widehat{u}_2(\eta, h) i \, dydud\eta.
 \end{aligned}$$

On a fait une intégration par parties en y pour obtenir la dernière intégrale. Les fonctions propres u_j ainsi que leurs dérivées ont une décroissance donnée par la distance d'Agmon au puits, en particulier elles sont dans la classe de Schwartz. Cela donne

$$|t| \leq C_h \|u_2\|_{L^1(\mathbb{R})} \|u'_1\|_{L^1(\mathbb{R})} R^{-1}.$$

Lorsque R tend vers $+\infty$, t tend donc vers 0. On traite de même les autres intégrales pour montrer que lorsque R tend vers $+\infty$, seule l'intégrale sur $[-R+i\alpha, R+i\alpha]_\xi \times [-R-i\alpha, R-i\alpha]_\eta$ ne tend pas vers 0. En choisissant $\alpha = 1 - \frac{h}{2b}$, on peut donc remplacer les contours \mathbb{R}_ξ et \mathbb{R}_η par respectivement

$$\left(\mathbb{R} + i - i\frac{h}{2b}\right)_\xi \quad \text{et} \quad \left(\mathbb{R} - i + i\frac{h}{2b}\right)_\eta.$$

Il reste à démontrer qu'on peut ajouter des fonctions troncatures $\tilde{\chi}$ en ξ et η comme dans (3.1). On écrit

$$u_1(y, h) = e^{-d(y, -x_0)/h} g_1(y, h) \quad \text{et} \quad u_2(z, h) = e^{-d(z, x_0)/h} g_2(z, h)$$

pour des fonctions g_j dont les dérivées sont majorées par $O(e^{\epsilon/h})$ pour tout $\epsilon > 0$, comme rappelé en (1.6) dans l'introduction. On a avec les notations de la proposition 3.1

$$\begin{aligned}
 w &= -\frac{i}{2\pi} \int_{\mathbb{R}^4} \frac{q(\tilde{\xi}) - q(\tilde{\eta})}{\tilde{\xi} + \tilde{\eta}} e^{-iy\tilde{\xi}/h} e^{-d(y, -x_0)/h} g_1(y, h) \\
 &\quad \times e^{-iz\tilde{\eta}/h} e^{-d(z, x_0)/h} g_2(z, h) \, dydzd\xi d\eta.
 \end{aligned}$$

Si ξ ou η est dans $\text{Supp}(1 - \tilde{\chi})$ on définit

$$L_1 = 1 - \tilde{\xi} + id'(y, -x_0) \frac{\partial}{\partial y}, \quad L_2 = \frac{1}{-\tilde{\eta} + id'(z, x_0)} \frac{\partial}{\partial z}.$$

Alors $\frac{h}{i} L_1 (e^{(i(x-y)\tilde{\xi} + id(y, -x_0))/h}) = e^{(i(x-y)\tilde{\xi} + id(y, -x_0))/h}$ et on a un résultat analogue pour L_2 . En appliquant plusieurs fois les opérateurs L_j dans l'intégrale définissant w , on montre que modulo un facteur multiplicatif $1 + O(h^\infty)$, on ne modifie pas w en ajoutant les fonctions troncatures $\tilde{\chi}$. On a (3.1). ■

On remplace maintenant les fonctions \widehat{u}_j par les prolongements WKB calculés dans la partie précédente. On appelle splitting formel, noté $s_F(h)$, le nombre ainsi obtenu.

Preuve du théorème 1.4 Modulo un terme négligeable, on a pour $N \geq 1$:

$$s_F(h) = -\frac{ih^{-1/2}}{\pi} \int_{\mathbb{R}^2} \frac{q(\tilde{\xi}) - q(\tilde{\eta})}{\tilde{\xi} + \tilde{\eta}} e^{i\psi_1(\tilde{\xi})/h} e^{i\psi_2(\tilde{\eta})/h} b^1(\tilde{\xi}, h) b^2(\tilde{\eta}, h) \tilde{\chi}(\xi) \tilde{\chi}(\eta) d\xi d\eta,$$

pour $b^j = \sum_{n=0}^N h^n b_n^j$, $j = 1, 2$. En utilisant l'expression des b_n^j dans la proposition 2.3, on a :

$$\begin{aligned} i\sqrt{h}\pi s_F(h) &= \sum_{0 \leq p, q \leq N} h^{p+q} \int e^{i\psi_1(\tilde{\xi})/h} e^{i\psi_2(\tilde{\eta})/h} \frac{q(\tilde{\xi}) - q(\tilde{\eta})}{\tilde{\xi} + \tilde{\eta}} \\ &\quad \times \frac{c_{p,0}^1(\tilde{\xi})}{(\tilde{\xi} - i)^{(p-1/2)}} \frac{c_{q,0}^2(\tilde{\eta})}{(\tilde{\eta} + i)^{(q-1/2)}} \tilde{\chi}(\xi) \tilde{\chi}(\eta) d\xi d\eta \\ &+ b_0^1(i) \sum_{0 \leq q \leq N} h^q \int e^{i\psi_1(\tilde{\xi})/h} e^{i\psi_2(\tilde{\eta})/h} \frac{q(\tilde{\xi}) - q(\tilde{\eta})}{\tilde{\xi} + \tilde{\eta}} \frac{c_{q,0}^2(\tilde{\eta})}{(\tilde{\eta} + i)^{(q-1/2)}} \tilde{\chi}(\xi) \tilde{\chi}(\eta) d\xi d\eta \\ &+ b_0^2(-i) \sum_{0 \leq p \leq N} h^p \int e^{i\psi_1(\tilde{\xi})/h} e^{i\psi_2(\tilde{\eta})/h} \frac{q(\tilde{\xi}) - q(\tilde{\eta})}{\tilde{\xi} + \tilde{\eta}} \frac{c_{p,0}^1(\tilde{\xi})}{(\tilde{\xi} - i)^{(p-1/2)}} \tilde{\chi}(\xi) \tilde{\chi}(\eta) d\xi d\eta \\ &+ b_0^1(i) b_0^2(-i) \int e^{i\psi_1(\tilde{\xi})/h} e^{i\psi_2(\tilde{\eta})/h} q(\tilde{\xi}) - q(\tilde{\eta}) \tilde{\xi} + \tilde{\eta} \tilde{\chi}(\xi) \tilde{\chi}(\eta) d\xi d\eta. \end{aligned}$$

On note $I_{p,q}$ les intégrales ci-dessus de sorte que :

$$i\sqrt{h}\pi s_F(h) = \sum_{p,q=0}^N h^{p+q} I_{p,q} + \sum_{q=0}^N h^q I_{-1,q} + \sum_{p=0}^N h^p I_{p,-1} + I_{-1,-1}.$$

Calculons $I_{-1,-1}$.

Le développement limité des fonctions ψ_j en $\pm i$ est donné grâce à (2.11) et à l'équation eiconale par :

$$\begin{aligned} \psi_1(\xi) &= id(-x_0, 0) + b(\xi - i) + \frac{4\sqrt{2}e^{-i\pi/4}}{3V'(-b)} (\xi - i)^{3/2} + O((\xi - i)^2), \\ \psi_2(\eta) &= id(x_0, 0) - b(\eta + i) + \frac{4\sqrt{2}e^{-i\pi/4}}{3V'(b)} (\eta + i)^{3/2} + O((\eta + i)^2), \end{aligned}$$

pour $-3\pi/2 < \arg(\xi - i) < \pi/2$ et $-\pi/2 < \arg(\eta + i) < 3\pi/2$.

Une étude des lignes de niveaux $\Im\psi_j = cste$ montre que modulo un terme exponentiellement petit quand h tend vers 0, on peut remplacer dans l'expression de

$I_{-1,-1}$ les contours en $\tilde{\xi}$ et $\tilde{\eta}$ par Γ_1 et Γ_2 , où pour $\epsilon > 0$ assez petit,

$$\Gamma_1 : \xi = i - i \frac{h}{2b}(1 + iu - u^2), \quad |u| \leq \epsilon/\sqrt{h},$$

$$\Gamma_2 : \eta = -i - i \frac{h}{2b}v_{\pm}, \quad 0 \leq v_{\pm} \leq \epsilon/h, \quad v_{\pm} = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} v \pm i\delta.$$

Cela conduit à :

$$I_{-1,-1} \sim i(h/b)^{3/2}e^{-S/h}b_0^1(i)b_0^2(-i)I,$$

$$I = \int_{\mathbb{R}_u \times \mathbb{R}_v^+} \frac{e^{(1+iu-u^2)/2}(1+2iu)e^{-v/2}\sqrt{v}}{1+iu-u^2+v} dudv,$$

où $f(h) \sim g(h)$ signifie $\lim_{h \rightarrow 0} f(h)g^{-1}(h) = 1$. On calcule

$$I = i \int_{C_w \times \mathbb{R}_v^+} \frac{e^{-w/2}e^{-v/2}\sqrt{v}}{v-w} dw dv,$$

où C est le contour donné par $w = -(1 + iu - u^2)$, $u \in \mathbb{R}$. Ainsi

$$I = -i \int_{\mathbb{R}_v^+ \times (C-v)_w} \frac{e^{-w/2}e^{-v/2}\sqrt{v}}{w} dw dv.$$

On déforme le contour de l'intégrale en w pour avoir un contour indépendant de v :

$$I = -i\Gamma(3/2) \int_{C_w} \frac{e^{-w/2}}{w} dw,$$

où $\Gamma(s) = \int_{\mathbb{R}^+} e^{-v}v^{s-1} dv$. Si on déforme C jusqu'à le ramener sur \mathbb{R}^+ , on montre que :

$$\int_{C_w} \frac{e^{-w/2}}{w} dw = \lim_{s \rightarrow -1} (1 - e^{2i\pi s})\Gamma(s) = 2i\pi.$$

Finalement, $I = 2\pi\Gamma(3/2)$.

On estime de la même manière les autres intégrales pour trouver :

$$(3.3) \quad I_{-1,q} = e^{-S/h}O(h^{2-p}), \quad p \geq 0,$$

$$(3.4) \quad I_{p,-1} = e^{-S/h}O(h^{2-q}), \quad q \geq 0,$$

$$(3.5) \quad I_{p,q} = e^{-S/h}O(h^{5/2-p-q}), \quad p \geq 0 \quad q \geq 0.$$

Finalement, le terme principal de $s_F(h)$ est donné par

$$s_F(h) \sim \frac{2h}{b^{3/2}}e^{-S/h}b_0^1(i)b_0^2(-i)\Gamma(3/2).$$

Il reste à remplacer $b_0^1(i)$ et $b_0^2(-i)$ par leurs expressions données dans la proposition 2.3. Cela termine la démonstration du théorème 1.4. ■

Ces calculs montrent que si la conjecture 1.5 était démontrée, on aurait le même terme principal pour le splitting réel.

4 Validation numérique

On considère désormais la famille de potentiels :

$$V_C(x) = -1 + C(x^2 - 1)^2, \quad C > 1$$

pour laquelle on va comparer le splitting formel avec un splitting numérique (mené avec matlab).

Avec les notations précédentes, on a $x_0 = 1$ et $b = (1 - \frac{1}{\sqrt{C}})^{1/2}$. De plus les hypothèses (H1) à (H4) sont vérifiées. On peut donc calculer le splitting formel pour $C > 1$,

$$(4.1) \quad s_F = h e^{-S_C/h} \frac{2(1-b)(8C)^{3/4} \exp\left(-\sqrt{8C} \int_{-1}^{-b} \left(\frac{V_C(y)}{\sqrt{1-V_C^2(y)}} + \frac{1}{\sqrt{8C(y+1)}}\right) dy\right)}{|4C(b^3 - b)|(\pi)^{1/2} b^{3/2}} \Gamma(3/2),$$

où $S_C = d_C(-1, 1)$ est la distance d'Agmon entre les puits ± 1 .

Remarque 4.1 Si $0 < C < 1$, le potentiel V_C reste négatif entre les deux puits et on peut calculer le splitting grâce aux travaux de B. Helffer et B. Parisse [5] :

$$s(h) \sim \sqrt{h} e^{-S_C/h} \left(\frac{\sqrt{2C}}{\pi}\right)^{1/2}.$$

On note ici une discontinuité du terme principal du splitting en $C = 1$, c'est à dire lorsque le potentiel devient positif entre les puits.

On veut maintenant calculer le splitting réel et le comparer avec le splitting formel donné en (4.1). Pour cela, on se ramène à l'étude d'un opérateur différentiel en considérant l'opérateur de Klein–Gordon conjugué avec la transformation de Fourier :

$$Q = \mathcal{F}P\mathcal{F}^{-1}.$$

La transformation de Fourier est un opérateur unitaire dans $L^2(\mathbb{R})$, et donc le spectre de Q est identique à celui de P . En particulier, le splitting entre les deux premières valeurs propres de Q sera égal à celui de P . On a

$$\begin{aligned} Q &= V_C\left(-\frac{h}{i} \frac{\partial}{\partial \xi}\right) + \sqrt{1 + \xi^2} \\ &= Ch^4 \frac{\partial^4}{\partial \xi^4} + 2Ch^2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \sqrt{1 + \xi^2} + C - 1. \end{aligned}$$

On fixe un intervalle assez grand et on discrétise l'opérateur Q sur cet intervalle [9]. On est alors ramené à un calcul de valeurs propres de matrices que l'on résout avec matlab. On obtient un splitting numérique noté s_N , que l'on compare avec le splitting formel s_F . Dans les graphes suivants, on a représenté le splitting formel s_F

(croix) et le splitting numérique s_N (points) sur la figure de gauche. Sur la figure de droite, on a représenté un coefficient d'erreur défini par :

$$E = \frac{|s_F - s_N|}{|s_F|},$$

et qui doit tendre vers 0 avec h pour valider les calculs formels. On obtient les graphes qui suivent, pour $C = 5$ et $C = 15$.

Remarquons que pour de trop petites valeurs de h , le splitting numérique n'est pas très bon. Cela s'explique par le fait que le splitting est exponentiellement petit, et nécessite donc une précision trop grande.

Pour des valeurs de h de plus en plus grandes, l'estimation asymptotique (quand h tend vers 0) de s_F est de moins en moins valide. Les graphes obtenus semblent donc bien montrer que le splitting formel donne le splitting réel.

A Normalisation des solutions WKB

On se place sous les hypothèses de la première partie, c'est-à-dire qu'on considère un opérateur de Klein–Gordon présentant un unique puits ponctuel de potentiel, pris en 0.

On va calculer ici une constante de normalisation de la solution $v_1(x, h)$. Pour cela, on s'appuie sur deux résultats : le premier est la proposition 2.1, qui montre que les solutions asymptotiques construites dans la première partie constituent une bonne approximation des fonctions propres. Le deuxième résultat qu'on utilise est la majoration des fonctions propres pour l'opérateur de Klein–Gordon donnée par B. Helffer et B. Parisse [5] et rappelée dans l'introduction (1.6).

Soit u une fonction propre normée pour la première valeur propre. On a

$$\int_{\mathbb{R}} |u(x, h)|^2 dx = \int_{V_0} |u|^2 + \int_{\mathbb{R} \setminus V_0} |u|^2,$$

où V_0 est un petit voisinage de 0 dans \mathcal{N} .

D'une part la majoration (1.6) conduit à :

$$\int_{\mathbb{R} \setminus V_0} |u|^2 \leq C e^{-\eta/h}, \quad \eta \geq d(\mathbb{R} \setminus V_0, 0) > 0$$

D'autre part, la proposition 2.1 donne

$$\begin{aligned} \int_{V_0} |u|^2 &= \int_{V_0} e^{-2d(x)/h} |a_0(x)|^2 dx (1 + O(h)) \\ &= \int_{V_0} e^{-2(\sqrt{V''(0)}x^2 + o(x^2))/2h} |a_0(0)|^2 dx (1 + O(h)), \end{aligned}$$

d'où

$$1 = \|u\|^2 = |a_0(0)|^2 \frac{h^{1/2}}{\sqrt{2\sqrt{V''(0)}}} \sqrt{2\pi} (1 + O(h)).$$

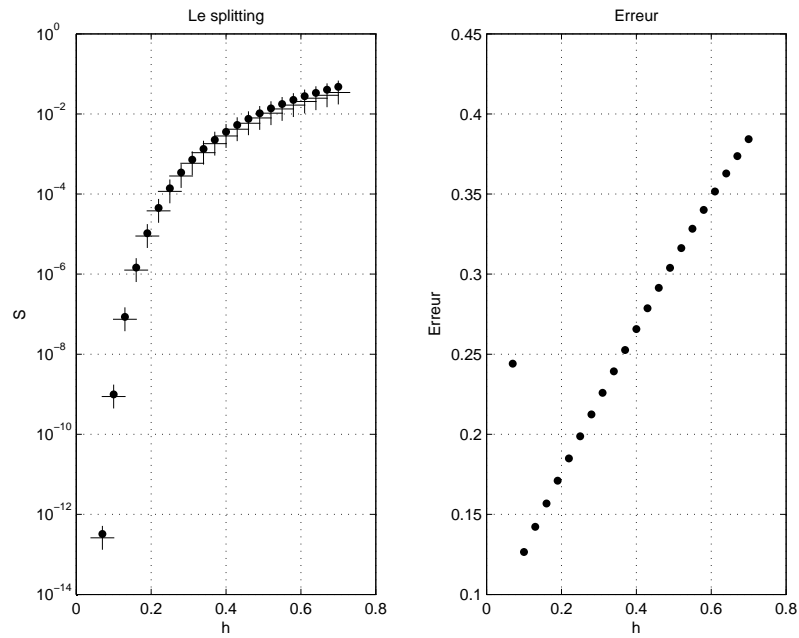


Figure 1: Comparaison entre les splittings formel et numérique pour $C = 5$

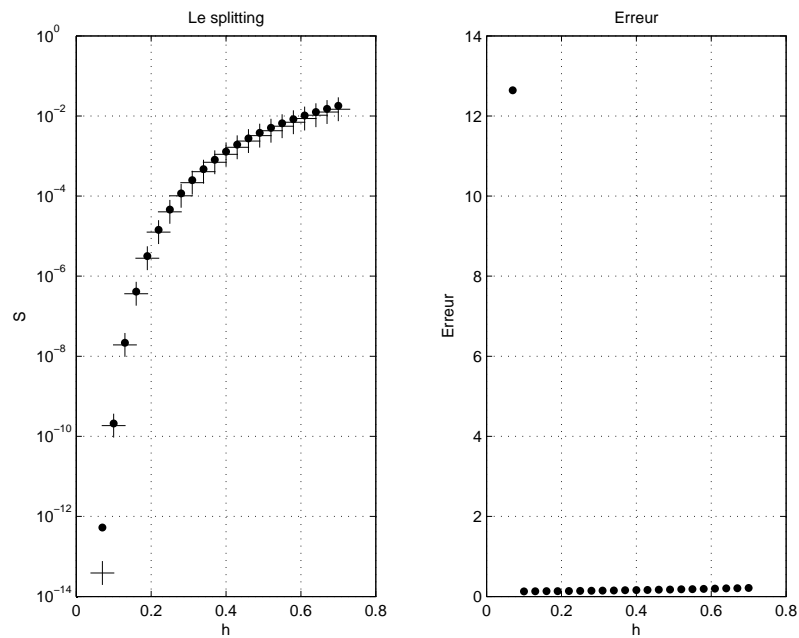


Figure 2: Comparaison entre les splittings formel et numérique pour $C = 15$

Et finalement, on obtient

$$v_1(x, h) = h^{-1/4} e^{-d(x)/h} (a_0(x) + O(h)),$$

où $a_0(0) = \left(\frac{\sqrt{V''(0)}}{\pi} \right)^{1/4}$.

Remerciement Je remercie chaleureusement le professeur Bernard Helffer pour ses nombreux conseils et relectures qui m'ont aidée dans la rédaction de ce travail.

Références

- [1] R. Carmona, W. C. Master, et B. Simon, *Relativistic Schrödinger operators: asymptotic behaviour of the eigenfunctions*. J. Funct. Anal. **91**(1990), no. 1, 117–142.
- [2] M. Dimassi et J. Sjöstrand, *Spectral asymptotics in the semi-classical limit*. London Mathematical Society Lecture Note Series 268, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.
- [3] A. Erdelyi, *Asymptotic expansions*. Dover Publications, New York, 1956.
- [4] E. M. Harrel, *Double wells*. Comm. Math. Phys. **75**(1980), no. 3, 239–261.
- [5] B. Helffer et B. Parisse, *Comparaison entre la décroissance de fonctions propres pour les opérateurs de Dirac et de Klein-Gordon. Application à l'étude de l'effet tunnel*. Ann. Inst. H. Poincaré Phys. Théor. **60**(1994), 147–187.
- [6] B. Helffer et J. Sjöstrand, *Multiple wells in the semi-classical limit. I*. Comm. Partial Differential Equations **9**(1984), no. 4, 337–408.
- [7] M. Reed et B. Simon, *Methods of modern mathematical physics. II. Fourier analysis, self-adjointness*. Academic Press, New York, 1975.
- [8] J. Sjöstrand, *Singularités analytiques microlocales*. Astérisque 95, Soc. Math. France, Paris, 1982, pp. 1–166.
- [9] L. N. Trefethen, *Spectral methods in MATLAB*. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA, 2000.

Université Paris 13
 Institut Galilée
 99 av. J.-B. Clément
 93430 Villetaneuse
 e-mail: amar@math.univ-paris13.fr