Journées mathématiques X-UPS

Année 2014

Chaos en mécanique quantique

Clotilde FERMANIAN KAMMERER

Opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques

Journées mathématiques X-UPS (2014), p. 59-111.
https://doi.org/10.5802/xups.2014-02

Les Éditions de l'École polytechnique
Route de Saclay
F-91128 PALAISEAU CEDEX
https://www.editions.polytechnique.fr

Centre de mathématiques Laurent Schwartz
CMLS, École polytechnique, CNRS,
Institut polytechnique de Paris
F-91128 PALAISEAU CEDEX
https://portail.polytechnique.edu/cmls/

Publication membre du
Centre Mersenne pour l'édition scientifique ouverte
www.centre-mersenne.org

Journées mathématiques X-UPS
2014, p. 59–111 doi: 10.5802/xups.2014-02

OPÉRATEURS PSEUDO-DIFFÉRENTIELS SEMI-CLASSIQUES

par

Clotilde Fermanian Kammerer

Résumé. Le but de ce texte est de reprendre et de développer les outils évoqués dans celui de Frédéric Faure de cet ouvrage, lesquels seront utilisés dans celui écrit par Nalini Anantharaman. Il s'agit tout particulièrement d'étudier les opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques et ce sera aussi l'occasion de parler de quelques développements de cette théorie. En particulier, nous verrons comment l'approche semi-classique permet de faire le lien entre mécanique classique et mécanique quantique.

Table des matières

Publication originelle dans Journées X-UPS 2014. Chaos en mécanique quantique. Éditions de l'École polytechnique, 2014.

Introduction

Le but de ce texte est de reprendre et de développer les outils évoqués dans celui de Frédéric Faure de cet ouvrage, lesquels seront utilisés dans celui écrit par Nalini Anantharaman. Il s'agit tout particulièrement d'étudier les opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques et ce sera aussi l'occasion de parler de quelques développements de cette théorie. En particulier, nous verrons comment l'approche semi-classique permet de faire le lien entre mécanique classique et mécanique quantique.

Les opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques sont les outils de base de l'analyse semi-classique dont le développement est intimement lié à celui de l'analyse micro-locale. L'analyse micro-locale (qui utilise le calcul pseudo-différentiel général, c'est-à-dire sans le petit paramètre appelé paramètre semi-classique que nous introduirons plus loin) s'est développée en France dans les années 1970, en particulier autour du séminaire Goulaouic-Schwartz qui avait lieu à l'École polytechnique. L'idée fondatrice de l'analyse micro-locale est d'étudier une fonction simultanément dans la variable d'espace, aussi appelé variable de position, et dans la variable de Fourier ou variable d'impulsion. En effet, de nombreux phénomènes nécessitent ces deux approches pour être bien compris, comme nous le verrons dans la suite. Avec un tel point de vue, il est crucial de disposer d'opérateurs de localisation en variables de position et d'impulsion, c'est le rôle des opérateurs pseudo-différentiels introduits par Shubin [Shu87] et systématiquement étudiés par Hörmander [Hör79].

On peut voir l'analyse semi-classique comme étant issue de l'intérêt d'une communauté imbibée de techniques micro-locales pour des questions de physique théorique. Il s'agit alors d'utiliser des techniques micro-locales en présence d'un petit paramètre ~ et d'analyser les propriétés micro-locales des objets à la limite ~ $\to 0$. Dans sa « bibliographie commentée » [Hel03] dont nous nous inspirons ici, Bernard Helffer situe les débuts de l'analyse semi-classique autour de 1977, prenant comme repère la date de la thèse d'André Voros [Vor77] où l'on voit apparaître dans un cadre semi-classique une utilisation du calcul pseudo-différentiel. Le paramètre ~ est très souvent lié à la constante de Planck mais il peut aussi résulter d'une analyse fine de l'ordre de grandeur des quantités physiques mises en jeu et d'un processus d'adimensionnement. C'est le cas par exemple en chimie quantique où l'analyse de la dynamique moléculaire dans le cadre de l'approximation de Born-Oppenheimer s'est développée avec une approche semi-classique. Le petit paramètre est alors lié au quotient de la masse de l'électron et de la masse moyenne du noyau de la molécule étudiée (cf. [BO27] par exemple).

C'est dans le cadre semi-classique que nous nous placerons ici et nous ne considérerons pas la théorie générale des opérateurs pseudo-différentiels. Le lecteur intéressé pourra se reporter aux nombreux excellents ouvrages qui existent sur ce sujet. Nous pensons en particulier aux livres [AG91, DS99, Ler10, Zwo12]. Il faut noter que des classes d'opérateurs pseudo-différentiels peuvent aussi être définies sur des groupes qui ne sont pas commutatifs (à la différence de l'espace euclidien ou du tore), que ce soit sur des groupes de Lie compacts (cf. [RT07]) ou des groupes de Lie non compacts comme dans l'article [BFKG12] pour le groupe de Heisenberg, ou dans le livre récent [FR14] pour le cas général des groupes de Lie stratifiés ; cette théorie est donc encore en plein essor.

Nous nous intéresserons plus particulièrement à ce que peut apporter le calcul pseudo-différentiel semi-classique à la mécanique quantique. Nous avons vu dans le texte de Frédéric Faure (ce volume) que la mécanique quantique est basée sur la notion de probabilité de présence et de fonction d'onde. Si cette dernière trouve une interprétation physique dans le cadre de la mécanique bohmienne, initiée par les physiciens Bohm et De Broglie, ce n'est pas le cas dans le cadre classique de l'école de Copenhague où, à la suite de Bohr et de Heisenberg, par exemple, on considère que la fonction d'onde n'a pas réellement de signification physique. C'est son module au carré qui s'interprète en terme de densité de probabilité de présence.

Dans un espace de configuration M, la fonction d'onde $\psi^\hbar$ est un élément de norme 1 dans l'espace $L^2(M)$ des fonctions de carré intégrable. Cette fonction dépend d'un paramètre $\hbar \in \mathbb{R}_+^*$ qui dépend des constantes de la physique, en particulier de la constante de Planck et que nous supposerons petit. En particulier, nous nous intéresserons à la limite $\hbar \to 0$. La densité

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

est une densité de probabilité sur M et c'est cette densité $n^\hbar$ qui permet de calculer les probabilités de la mécanique quantique. La variable $x \in M$ décrit une configuration particulière de la particule étudiée et si A est une partie mesurable de M, la quantité

$$P(A) = \int_A n^\hbar(x)dx$$

donne la probabilité de trouver la particule quantique dans une configuration décrite par un point de la partie A. Dans ce texte, M sera en général l'espace euclidien de dimension d, $\mathbb{R}^d$; mais nous considérerons aussi le cas du tore $\mathbb{T}^d$ de dimension d, ou bien le cas d'une sous-variété de $\mathbb{R}^d$.

Les espaces fonctionnels de la mécanique quantique sont donc construits sur l'espace de Lebesgue $L^2(M)$ des fonctions mesurables et de carré intégrable sur M. Cet espace muni de la norme

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

est un espace de Hilbert dont nous écrirons le produit scalaire

$$\langle f, g\rangle = \int_M \overline{f}(x)g(x)dx.$$

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

$$\forall f, g \in L^2(M), \quad |\langle f, g\rangle| \leqslant \|f\|_{L^2}\|g\|_{L^2}.$$

Dans le cas où $M = \mathsf{R}^d$, nous allons voir que l'espace vectoriel $L^2(\mathsf{R}^d)$ est muni d'un automorphisme donné par la *transformée de Fourier*. Pour définir la transformée de Fourier, nous allons utiliser l'espace $\mathcal{S}(\mathsf{R}^d)$ des fonctions à décroissance rapide sur R^d, c'est-à-dire des fonctions $f \in C^\infty(\mathsf{R}^d)$ telles que

$$\forall \alpha, \beta \in \mathsf{N}^d, \quad \exists C_{\alpha,\beta} > 0, \quad \sup_{x\in\mathsf{R}^d} \left|x^\alpha \partial_x^\beta f(x)\right| \leqslant C_{\alpha,\beta}, \tag{0.1}$$

où pour $\gamma = (\gamma_1, \ldots, \gamma_d) \in \mathsf{N}^d$, on pose

$$x^\gamma = x_1^{\gamma_1} \cdots x_d^{\gamma^d} \quad \text{et} \quad \partial_x^\gamma = \partial_{x_1}^{\gamma_1} \cdots \partial_{x_d}^{\gamma_d}.$$

On définit alors une application linéaire $\mathcal{F}$ sur $\mathcal{S}(\mathsf{R}^d)$ en posant $\mathcal{F}(f) = \widehat{f}$ où

$$\forall f \in \mathcal{S}(\mathsf{R}^d), \quad \forall \xi \in \mathsf{R}^d, \quad \widehat{f}(\xi) = \int_{\mathsf{R}^d} \mathrm{e}^{-ix\cdot\xi} f(x)dx.$$

Du fait des propriétés :

$$\forall j \in \{1, \ldots, d\}, \quad \widehat{\partial_{x_j} f}(\xi) = i\xi_j \widehat{f}(\xi), \quad \partial_{\xi_j} \widehat{f}(\xi) = \widehat{ix_j f}(\xi), \tag{0.2}$$

l'application $\mathcal{F}$ envoie $\mathcal{S}(\mathsf{R}^d)$ dans lui-même. On peut alors démontrer la formule d'inversion de Fourier

$$\forall f \in \mathcal{S}(\mathsf{R}^d), \quad f(x) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathsf{R}^d} \mathrm{e}^{ix\cdot\xi} f(\xi)d\xi,$$

qui nous dit que $\mathcal{F}$ est un isomorphisme de $\mathcal{S}(\mathsf{R}^d)$ dans lui-même, de bijection réciproque $\mathcal{F}^{-1}$ définie par

$$\forall g \in \mathcal{S}(\mathsf{R}^d), \quad \forall x \in \mathsf{R}^d, \quad \mathcal{F}^{-1}(g)(x) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathsf{R}^d} \mathrm{e}^{ix\cdot\xi} g(\xi)d\xi.$$

On peut alors utiliser la densité de $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ pour étendre $\mathcal{F}$ en un automorphisme de l'espace vectoriel $L^2(\mathbb{R}^d)$. On démontre alors le *théorème de Plancherel*, à savoir

$$\forall f,g \in L^2(\mathbb{R}^d), \quad \langle \widehat{f}, \widehat{g}\,\rangle = (2\pi)^d \langle f, g\rangle, \tag{0.3}$$

ce qui implique que l'application $(2\pi)^{-d/2}\mathcal{F}$ est une transformation unitaire de $L^2(\mathbb{R}^d)$.

Comme nous l'avons dit plus haut, certains phénomènes se comprennent mieux si on les étudie aussi dans les variables de Fourier. Pensons par exemple aux obstructions à la convergence forte (ou convergence en norme) vers 0 dans $L^2(\mathbb{R}^d)$ des familles

$$u_\hbar(x) = \hbar^{-d/2}\Phi\left((x-x_0)/\hbar\right) \quad \text{et} \quad v_\hbar(x) = \Phi(x)\mathrm{e}^{ix\cdot\xi_0/\hbar} \tag{0.4}$$

où $x_0, \xi_0 \in \mathbb{R}^d$ et $\Phi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ ($C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ désigne l'espace des fonctions C^∞ à support compact sur $\mathbb{R}^d$). En effet, pour ces deux familles nous avons

$$\|v_\hbar\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \|u_\hbar\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \|\Phi\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \neq 0.$$

Mais, si l'on multiplie $u_\hbar$ par une fonction φ, régulière, bornée, et s'annulant en x_0, alors la norme de $\varphi u_\hbar$ tend vers 0 lorsque $\hbar$ tend vers 0. Le point x_0 (qui est un point de concentration de la famille $(u_\hbar)$) est un point d'obstruction à la convergence forte de $(u_\hbar)$ vers 0 dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. On se convaincra rapidement qu'il n'est pas possible de faire la même chose avec la famille $(v_\hbar)$ en travaillant dans les variables x. Néanmoins, cela devient possible en se plaçant dans les variables de Fourier. En effet, dans ces variables, les oscillations de $(v_\hbar)$ s'interprètent comme une concentration sur ξ_0 puisque l'on a

$$\hbar^{-d/2}\widehat{v_\hbar}\left(\xi/\hbar\right) = \hbar^{-d/2}\widehat{\Phi}\left((\xi-\xi_0)/\hbar\right).$$

En Fourier, on voit que c'est le vecteur ξ_0 qui constitue l'obstruction à la convergence forte de la famille $(v_\hbar)$. Pour l'éliminer, il suffit de multiplier $\widehat{v}_\hbar$ par une fonction ϕ, régulière et bornée, et s'annulant près de ξ_0, après avoir fait une mise à l'échelle convenable. Pour expliquer ce point, il est commode d'avoir quelques notations. On associe à la fonction ϕ un opérateur sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ noté $\phi(\hbar D)$ en posant

$$\forall f \in L^2(\mathbb{R}^d), \;\; \mathcal{F}(\phi(\hbar D)f)(\xi) = \phi(\hbar\xi)\mathcal{F}(f)(\xi). \tag{0.5}$$

Un tel opérateur est appelé multiplicateur de Fourier car c'est tout simplement un opérateur de multiplication dans les variables de Fourier. La fonction de la variable ξ

$$\mathcal{F}(\phi(\hbar D)v_\hbar)(\xi) = \phi(\hbar\xi)\mathcal{F}(v_\hbar)(\xi),$$

tend vers 0 en norme L^2, et, par le théorème de Plancherel (0.3) il en est de même pour $\phi(\hbar D)v_\hbar$. L'action de l'opérateur $\phi(\hbar D)$ a permis d'éliminer l'obstruction à la convergence forte que constituait le vecteur ξ_0. Pour des familles possédant simultanément des phénomènes de concentration et d'oscillation, on a besoin de disposer d'opérateurs permettant de jouer simultanément sur les variables usuelles et les variables de Fourier, c'est le rôle des opérateurs pseudo-différentiels.

Dans l'exemple ci-dessus, on a vu apparaître la $\hbar$-transformée de Fourier, que nous noterons $\mathcal{F}_\hbar$ et que l'on définit par

$$\forall f \in L^2(\mathsf{R}^d), \quad \forall \xi \in \mathsf{R}^d, \quad \mathcal{F}_\hbar(f)(\xi) = \frac{1}{\hbar^{d/2}}\widehat{f}\,(\xi/\hbar)\,.$$

Rappelons que le paramètre $\hbar$ appartient à R_+^* ; les quantités introduites ci-dessus sont donc bien définies. L'application $(2\pi)^{-d/2}\mathcal{F}_\hbar$ est un automorphisme unitaire de $L^2(\mathsf{R}^d)$. Avec cette transformée de Fourier, on peut étudier la fonction f en variable de Fourier à l'échelle $1/\hbar$. Traditionnellement, et à cause des relations (0.2), on interprète la variable de Fourier ξ comme la variable d'impulsion et on définit la densité en impulsion par

$$\widetilde{n^\hbar}(\xi)d\xi = (2\pi\hbar)^{-d}\left|\mathcal{F}_\hbar(\psi^\hbar(\xi))\right|^2 d\xi.$$

L'espace des positions-impulsions (x, ξ) est appelé l'espace des phases et c'est dans cet espace que l'on veut travailler. Nous avons déjà vu dans la section 1 du texte de Frédéric Faure (ce volume, [Fau14]), et nous reverrons plus loin, comment cet espace s'interprète comme l'espace cotangent à R^d et comment on peut généraliser ces notions dans le cas d'une variété M.

Pour étudier les densités en impulsion et en position, on les teste contre des fonctions de $C_0^\infty(\mathsf{R}^d)$. On peut représenter ces deux tests comme l'action d'un opérateur sur la fonction d'onde :

$$\forall \varphi \in C_0^\infty(\mathsf{R}^d), \quad \int_{\mathsf{R}^d} \varphi(x) n^{\sim}(x) dx = \langle \psi^{\sim}, \varphi(x)\psi^{\sim} \rangle_{L^2(\mathsf{R}^d)},$$
$$\forall \phi \in C_0^\infty(\mathsf{R}^d), \quad \int_{\mathsf{R}^d} \phi(\xi) \widetilde{n^{\sim}}(\xi) d\xi = \langle \psi^{\sim}, \phi(\sim D)\psi^{\sim} \rangle_{L^2(\mathsf{R}^d)},$$

où l'opérateur $\varphi(x)$ est l'opérateur de multiplication par $\varphi(x)$ et l'opérateur $\phi(\sim D)$ est le multiplicateur de Fourier défini sur $L^2(\mathsf{R}^d)$ par la relation (0.5). On appelle *observables* les fonctions $\varphi(x)$ et $\phi(\xi)$, on leur a associé des opérateurs dont l'action sur les fonctions d'onde renseigne sur la valeur moyenne des observables $\varphi(x)$ et $\phi(\xi)$ pour le système étudié. Comme nous l'avons déjà dit, l'intérêt des opérateurs pseudo-différentiels est de concilier les points de vue position et impulsion en permettant de considérer des observables qui soient des fonctions des deux variables x et ξ. Il s'agit donc de construire une algèbre d'opérateurs contenant les opérateurs de multiplication en variable de position ainsi que les multiplicateurs de Fourier, c'est-à-dire de trouver un processus de quantification associant à une fonction $a \in C_0^\infty(\mathsf{R}^{2d})$ un opérateur $\mathrm{Op}_{\sim}(a)$ défini sur $L^2(\mathsf{R}^d)$. On demandera à ce processus de quantification que dans le cas où a ne dépend que de x, l'opérateur obtenu est l'opérateur de multiplication par $a(x)$ tandis que si a ne dépend que de ξ, on retrouve l'opérateur $a(\sim D)$.

Un point de vue équivalent consiste à dire que l'on va remplacer les densités $n^{\sim}(x)$ et $\widetilde{n^{\sim}}(\xi)$ par une densité généralisée $w^{\sim}(x,\xi)$ dont les densités $n^{\sim}(x)$ et $\widetilde{n^{\sim}}(\xi)$ seront les marginales en ξ et en x respectivement, c'est-à-dire qu'on les retrouvera en projetant $w^{\sim}(x,\xi)$ sur l'espace des x ou l'espace des ξ respectivement. Plus précisément, pour toute fonction $\phi, \varphi \in C_0^\infty(\mathsf{R}^d)$, on aura

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

Cette idée remonte aux travaux du physicien théoricien Eugène Paul Wigner [Wig32]. Celui-ci partagea avec deux autres physiciens le prix Nobel de physique 1963 pour ses contributions à la théorie du noyau atomique [Wig59]. L'utilisation de la transformée de Wigner permet de profiter d'un cadre de travail très confortable même si cela se fait au prix d'une légère perte de structure car la fonction $w^\hbar$, que l'on appelle alors *transformée de Wigner de la famille* $\psi^\hbar$, n'est pas une densité, tout simplement parce que ce n'est pas une fonction positive. Cette fonction $w^\hbar$ est dans $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ et son action contre des observables $a(x,\xi) \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ prend son sens le plus achevé dans le cadre de la théorie des distributions de Laurent Schwartz, personnalité marquante de l'École polytechnique.

Le processus de quantification que nous allons utiliser permet de transcrire l'action de $w^\hbar$ sur une fonction test a en terme d'action de l'opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ sur la fonction d'onde $\psi^\hbar$

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

Nous verrons que la positivité « perdue » de la transformée de Wigner se retrouve en passant à la limite $\hbar \to 0$; on peut alors montrer que toute limite faible (au sens des distributions) de $w^\hbar$ est une mesure positive. C'est la théorie des mesures semi-classiques ou mesures de Wigner dont l'utilisation a permis par exemple de démontrer d'importants résultats sur les fonctions propres du laplacien sur une sous-variété (cf. [GL93] et [AM14] par exemple) ainsi que dans d'autres domaines.

Nous commencerons par donner la définition et les premières propriétés des opérateurs pseudo-différentiels sur $\mathbb{R}^d$. En particulier, nous nous attacherons à étudier l'action de ces opérateurs sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ et décrirons quelques résultats de calcul symbolique pseudo-différentiel (formules de composition, inégalité de Gårding, calcul fonctionnel, théorème d'Egorov). Puis, nous nous intéresserons aux propriétés des opérateurs pseudo-différentiels liées à des aspects géométriques. Cette analyse nous permettra d'étudier la structure géométrique de l'espace des phases et ouvrira la voie à la généralisation du calcul pseudo-différentiel sur des variétés. Dans un dernier chapitre, nous nous intéresserons au cas des opérateurs pseudo-différentiels sur le tore.

1. Opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques sur $\mathbb{R}^d$

1.1. Définitions

Opérateur pseudo-différentiel. Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ et $\hbar \in]0,1]$ un petit paramètre. On définit l'opérateur pseudo-différentiel semi-classique de symbole a par son action sur les fonctions à décroissance rapide. Rappelons que de telles fonctions sont indéfiniment dérivables et vérifient (0.1). On pose alors

$$\text{(1.1)} \quad \forall f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d), \quad \mathrm{Op}_\hbar(a) f(x) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} f(y)\, dy\, d\xi.$$

Comme on l'a fait remarquer précédemment, si $a = a(x)$, $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ est l'opérateur de multiplication par $a(x)$. Et si $a = a(\xi)$, alors $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ est le multiplicateur de Fourier $a(\hbar D)$ défini en (0.5).

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

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

On remarquera que la fonction $w^\hbar$ est une fonction de $L^2(\mathbb{R}^{2d})$ avec

$$\|w^\hbar\|^2_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} = (2\pi\hbar)^{-d} \|\psi^\hbar\|^4_{L^2(\mathbb{R}^d)}.$$

Ce contrôle en norme L^2 de $w^\hbar$ n'est pas uniforme en $\hbar$. Néanmoins il nous permet de définir la quantité $\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x,\xi) w^\hbar(x,\xi)\, dx\, d\xi$ comme l'intégrale d'une fonction $L^1(\mathbb{R}^{2d})$. L'analyse de l'opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ nous permettra d'établir des contrôles uniformes en $\hbar$.

Le lien entre opérateur pseudo-différentiel et transformée de Wigner est alors donné par la relation

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

1.2. Action sur la classe de Schwartz. Dans cette section, nous allons étudier l'action des opérateurs pseudo-différentiels dans l'ensemble $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ des fonctions à décroissance rapide. Nous allons démontrer la proposition suivante.

Proposition 1.1. *L'opérateur* $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ *envoie* $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ *sur lui-même.*

Démonstration. Il faut d'abord remarquer que si $f \in \mathcal{S}(\mathsf{R}^d)$, l'intégrale (1.1) est convergente à cause de la décroissance rapide de f et parce que a est à support compact. Le fait que $\mathrm{Op}_\hbar(a)f$ est dans $\mathcal{S}(\mathsf{R}^d)$ vient ensuite de deux observations qui sont à la base de l'analyse des opérateurs pseudo-différentiels. Il s'agit de deux intégrations par parties extrêmement simples. Pour $j \in \{1,\dots,d\}$, on remarque tout d'abord que l'on a

$$\begin{aligned}
&\partial_{x_j}\big[\big(\mathrm{Op}_\hbar(a)f\big)\big](x)\\
&\qquad= \frac{1}{2}(2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathsf{R}^{2d}} \partial_{x_j} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\, \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} f(y)dy\\
&\qquad\qquad - (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathsf{R}^{2d}} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\,\partial_{y_j}\big(\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}\big) f(y)dy\,d\xi.
\end{aligned}$$

Une intégration par parties permet de transformer le deuxième terme du membre de droite, on écrit

$$\begin{aligned}
&\int_{\mathsf{R}^{2d}} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\,\partial_{y_j}\big(\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}\big) f(y)dy\,d\xi\\
&\qquad= -\frac{1}{2}\int_{\mathsf{R}^{2d}} \partial_{x_j} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} f(y)dy\,d\xi\\
&\qquad\qquad - \int_{\mathsf{R}^{2d}} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}\partial_{x_j} f(y)dy\,d\xi.
\end{aligned}$$

On en déduit

$$\begin{aligned}
&\partial_{x_j}\big[\big(\mathrm{Op}_\hbar(a)f\big)\big](x)\\
&\qquad= (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathsf{R}^{2d}} \partial_{x_j} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} f(y)dy\,d\xi\\
&\qquad\qquad + (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathsf{R}^{2d}} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}\partial_{x_j} f(y)dy\,d\xi\\
&\qquad= \mathrm{Op}_\hbar(a)(\partial_{x_j} f)(x) + \mathrm{Op}_\hbar(\partial_{x_j} a)f(x)
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
&x_j\mathrm{Op}_\hbar(a)f(x)\\
&\qquad= (2\pi\hbar)^{-d}\frac{\hbar}{i}\int_{\mathsf{R}^{2d}} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\,\partial_{\xi_j}\big(\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}\big) f(y)dy\,d\xi\\
&\qquad\qquad + (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathsf{R}^{2d}} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} y_j f(y)dy\,d\xi.
\end{aligned}$$

Une intégration par parties dans le premier terme du membre de droite donne

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\,\partial_{\xi_j}\big(\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}\big)f(y)dy\,d\xi \\ - \int_{\mathbb{R}^{2d}} \partial_{\xi_j} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}f(y)dy\,d\xi.$$

On obtient alors

$$\begin{aligned} x_j\mathrm{Op}_\hbar(a)f(x) & \\ &= i\hbar(2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} \partial_{\xi_j} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}f(y)dy\,d\xi \\ &\qquad + (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\xi\big)\,\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)}y_jf(y)dy\,d\xi \\ &= \mathrm{Op}_\hbar(a)(x_jf)(x) + i\hbar\mathrm{Op}_\hbar(\partial_{\xi_j}a)f(x) \end{aligned}$$

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

On remarquera en passant que l'on a montré des formules de commutation. En effet, si A et B sont deux opérateurs, notons $[A,B]$ leur commutateur défini par

$$[A,B] = AB - BA.$$

Alors le calcul ci-dessus nous donne

$$[\partial_{x_j},\mathrm{Op}_\hbar(a)] = \mathrm{Op}_\hbar(\partial_{x_j}a) \quad \text{et} \quad [x_j,\mathrm{Op}_\hbar(a)] = i\hbar\,\mathrm{Op}_\hbar(\partial_{x_j}a).$$

Nous verrons au paragraphe 3 que l'on peut généraliser ces formules de commutation.

1.3. Autres choix de quantification. On doit au mathématicien (et physicien théoricien) Hermann Weyl les premiers travaux visant à associer à une observable $a(x,\xi)$ un opérateur, c'est-à-dire à « quantifier » l'observable $a(x,\xi)$. C'est pour cette raison que l'on appelle *quantification de Weyl* le procédé donné par l'équation (1.1) pour associer à la fonction a l'opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a)$, procédé qu'il a proposé dans [Wey27]. D'autres choix de quantification sont possibles et utilisés : on parle de la *quantification classique* ou *quantification gauche* avec l'opérateur $a(x,\hbar D)$ défini par

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

On peut voir la quantification de Weyl et la quantification classique comme des cas particuliers de la *t-quantification* définie par

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

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

Remarque. Nous terminons par une remarque mettant en lumière le lien entre la définition que nous avons donnée ici et celle donnée dans la section 1.2 du texte de Frédéric Faure dans ce volume [Fau14] (cf. l'équation (1.32)). Soit $\widetilde{a}$ la fonction définie via la transformation de Fourier par

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

nous obtenons

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

d'où la formule

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

2. Action sur $L^2(\mathsf{R}^d)$

L'analyse de l'action des opérateurs pseudo-différentiels sur $L^2(\mathsf{R}^d)$ se fait aisément une fois que l'on a remarqué que $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ est un opérateur à noyau. Rappelons que l'on dit qu'un opérateur P défini sur un espace fonctionnel adéquat admet comme noyau la fonction k définie sur R^{2d} si l'image par P d'une fonction f du domaine de P est donnée par la formule

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

Dans le cas de l'opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a)$, son noyau est la fonction

$$\begin{aligned} k_\hbar(x, y) &= (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathsf{R}^d} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y), \xi\big) d\xi \\ &= \hbar^{-d} K_a\big(\tfrac{1}{2}(x+y), \tfrac{1}{\hbar}(x-y)\big) \end{aligned} \tag{2.1}$$

où

$$K_a(X, v) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathsf{R}^d} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot v} a\,(X, \xi)\, d\xi.$$

La fonction K_a est donc la transformée de Fourier inverse de la fonction $\xi \mapsto a(X, \xi)$. Nous noterons $\mathcal{F}_\xi^{-1} a\,(X, \cdot)$ cette transformée de Fourier inverse, afin de rappeler que la variable X est fixée et que l'aspect Fourier concerne la variable ξ. On a donc

$$K_a(X, v) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathsf{R}^d} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot v} a\,(X, \xi)\, d\xi =: \mathcal{F}_\xi^{-1} a\,(X, v)\,. \tag{2.2}$$

Notons qu'on peut retrouver le symbole à partir du noyau grâce à la formule

$$a(x, \xi) = \int_{\mathsf{R}^d} \mathrm{e}^{-i\xi\cdot v} K_a(x, v) dv. \tag{2.3}$$

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

2.1. Lemme de Schur. Le lemme de Schur permet d'étudier la norme d'opérateurs à noyau définis sur $L^2(\mathsf{R}^d)$. Nous notons $\mathcal{L}(L^2(\mathsf{R}^d))$ l'ensemble des endomorphismes continus de $L^2(\mathsf{R}^d)$ et posons

$$\forall P \in \mathcal{L}(L^2(\mathsf{R}^d)), \quad \|P\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathsf{R}^d))} = \sup_{\|f\|_{L^2(\mathsf{R}^d)}=1} \|Pf\|_{L^2(\mathsf{R}^d)}.$$

Lemme 2.1. *Soit P un opérateur sur $L^2(\mathsf{R}^d)$ de noyau $k(x,y)$:*

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

S'il existe $C > 0$ tel que

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

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

$$\|P\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathsf{R}^d))} \leqslant C.$$

Démonstration. Soit $f \in L^2(\mathsf{R}^d)$. On écrit

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

En utilisant

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

on obtient (en utilisant le théorème de Fubini pour intervertir les ordres d'intégration)

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

Une conséquence immédiate du lemme de Schur est le corollaire suivant.

Corollaire 2.2. *Soit $P_\hbar$ un opérateur de noyau $k_\hbar(x,y)$ de la forme*

$$k_\hbar(x,y) = \hbar^{-d} K\big(\tfrac{1}{2}(x+y), \tfrac{1}{\hbar}(x-y)\big)$$

et tel que la fonction K vérifie

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

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

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

Démonstration. Pour $x \in \mathsf{R}^d$, on a

$$\int |k_\hbar(x,y)| dy = \int |K\left(x - \hbar v/2, v\right)|\, dv \leq \int \sup_{X \in \mathsf{R}^d} |K(X,v)| dv.$$

De même, pour $y \in \mathsf{R}^d$,

$$\int |k_\hbar(x,y)| dx = \int |K\left(y + \hbar v/2, v\right)|\, dv \leq \int \sup_{X \in \mathsf{R}^d} |K(X,v)| dv.$$

Le corollaire 2.2 est alors une conséquence directe du lemme de Schur.

2.2. Application aux opérateurs pseudo-différentiels. Nous pouvons maintenant étudier l'opérance sur $L^2(\mathsf{R}^d)$ des opérateurs pseudo-différentiels. En effet, le corollaire 2.2 ci-dessus implique le résultat suivant.

Théorème 2.3. *Pour $a \in C_0^\infty(\mathsf{R}^{2d})$, la famille d'opérateurs $(\mathrm{Op}_\hbar(a))_{\hbar>0}$ est bornée dans $\mathcal{L}(L^2(\mathsf{R}^d))$ et*

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

Si l'on veut estimer la constante $C(a)$ en fonction de normes portant directement sur la fonction a et non sur sa transformée de Fourier, on peut remarquer que pour $v \in \mathsf{R}^d$ et $\alpha \in \mathsf{N}^d$,

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

où pour $\alpha = (\alpha_1, \cdots, \alpha_d) \in \mathsf{N}^d$, on pose

$$D_\xi^\alpha = \left(\frac{1}{i}\partial_{\xi_1}\right)^{\alpha_1} \cdots \left(\frac{1}{i}\partial_{\xi_d}\right)^{\alpha_d}.$$

Par conséquent, pour tout $n \in \mathbb{N}$,

$$\begin{aligned}
\int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X\in\mathbb{R}^d} \left|\mathcal{F}_\xi^{-1} a(X,v)\right| dv
&\leqslant \int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X\in\mathbb{R}^d} \left|\mathcal{F}^{-1}\Big((1+|D_\xi|^2)^{n/2} a\Big)(X,v)\right| (1+|v|^2)^{-n} dv \\
&\leqslant C \sup_{(X,v)\in\mathbb{R}^d} \left|\mathcal{F}^{-1}\Big((1+|D_\xi|^2)^{n/2} a\Big)(X,v)\right| \int_{\mathbb{R}^d} (1+|v|^2)^{-n} dv \\
&\leqslant C \sup_{X\in\mathbb{R}^d} \left\|(1+|D_\xi|^2)^{n/2} a\right\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}.
\end{aligned}$$

Ainsi, nous avons le corollaire suivant où l'on utilise la notation

$$\forall \gamma = (\gamma_1,\dots,\gamma_d) \in \mathbb{N}^d, \quad |\gamma| = \gamma_1 + \cdots + \gamma_d.$$

Corollaire 2.4. *Il existe une constante $c>0$ telle que*

$$\forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}), \quad \|\mathrm{Op}_\hbar(a)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leqslant c \sup_{\substack{\beta\in\mathbb{N}^d\\ |\beta|\leqslant d+1}} \sup_{x\in\mathbb{R}^d} \left\|\partial_\xi^\beta a(x,\bullet)\right\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}. \tag{2.4}$$

On peut remarquer que ce résultat permet de définir des opérateurs pseudo-différentiels pour des symboles comportant peu de régularité en x. Il suffit que a soit à support compact et que $\partial_\xi^\beta a$ soit bornée et intégrable pour tout multi-indice $\beta \in \mathbb{N}^d$ tel que $|\beta| \leqslant d+1$.

Ici, on a choisi une estimation de la norme de $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ qui ne « consomme » que des dérivées en ξ mais en nombre conséquent. En jouant avec la transformée de Fourier, on peut obtenir une estimation analogue ne « consommant » que des dérivées dans la variable x. En effet, si $\underline{a}(x,\xi) = a(\xi,x)$, on a

$$\langle f, \mathrm{Op}_\hbar(a) g\rangle = (2\pi)^{-d} \langle \mathcal{F}_\hbar(f), \mathrm{Op}_\hbar(\underline{a}) \mathcal{F}_\hbar(g)\rangle, \quad \forall f,g \in L^2(\mathbb{R}^d).$$

On en déduit

$$\|\mathrm{Op}_\hbar(a)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} = (2\pi)^{-d} \|\mathrm{Op}_\hbar(\underline{a})\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))}$$

et le corollaire 2.4 donne

$$\|\mathrm{Op}_\hbar(a)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leqslant C \sup_{\substack{\beta\in\mathbb{N}^d\\ |\beta|\leqslant d+1}} \sup_{\xi\in\mathbb{R}^d} \left\|\partial_x^\beta a(\cdot,\xi)\right\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}, \tag{2.5}$$

pour une constante $C>0$ indépendante de a et de $\hbar$.

L'estimation la plus utilisée dans la littérature est celle de Calderón-Vaillancourt [CV71] : il existe $N\in\mathbb{N}^*$ et $C>0$ tel que pour tout $a\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$,

$$\|\mathrm{Op}_\sim(a)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leqslant C \sup_{|\alpha|+|\beta|\leqslant N}\ \sup_{(x,\xi)\in\mathbb{R}^{2d}} \left|\partial_x^\alpha\partial_\xi^\beta a(x,\xi)\right|. \tag{2.6}$$

L'avantage de cette estimation est de faire intervenir des normes L^∞ et non des normes L^1 comme dans les estimation (2.4) ou (2.5). En particulier, si $w^\sim$ est la transformée de Wigner d'une famille $(\psi^\sim)$ uniformément bornée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, on obtient le contrôle : $\forall a\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$,

$$\left|\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x,\xi)w^\sim(t,x,\xi)dx\,d\xi\right| \leqslant C \sup_{|\alpha|+|\beta|\leqslant N}\ \sup_{(x,\xi)\in\mathbb{R}^{2d}} \left|\partial_x^\alpha\partial_\xi^\beta a(x,\xi)\right|. \tag{2.7}$$

Cette dernière estimation (2.7) montre que $w^\sim$ définit une distribution sur $\mathbb{R}^{2d}$ car l'estimation (2.7) correspond exactement au contrôle que doit vérifier une forme linéaire sur $C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ pour être une distribution au sens de la théorie développée par Laurent Schwartz (cf. le paragraphe 2 page 6 du livre [AG91]).

Le lecteur intéressé pourra consulter avec profit l'article [CV71] dans lequel est démontrée l'estimation (2.6) et précisé l'entier N ; il y est montré (dans le cadre de la quantification classique) que le contrôle des dérivées du symbole est seulement nécessaire pour des multi-entiers $\alpha=(\alpha_1,\dots,\alpha_d)$ et $\beta=(\beta_1,\dots,\beta_d)$ tels que $\alpha_j,\beta_j\in\{0,1,2,3\}$ pour tout $j\in\{1,\dots,d\}$. À notre connaissance, l'estimation la moins coûteuse en termes de dérivées est due à Hwang (cf. [Hwa87] ou l'exercice 5.3 p. 59 de [AG91]), pour la quantification classique également : il existe $C>0$ tel que pour tout $a\in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$,

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

3. Premières propriétés des opérateurs pseudo-différentiel

Dans ce paragraphe, nous décrivons quelques propriétés des opérateurs pseudo-différentiels en tant qu'opérateurs sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H}=L^2(\mathbb{R}^d)$. Ce sont essentiellement des propriétés directement liées au noyau de l'opérateur. Nous comparerons aussi les différentes quantifications que nous avons vues précédemment.

3.1. Opérateurs de Hilbert-Schmidt. Rappelons quelques notions concernant les opérateurs définis sur un espace de Hilbert $\mathcal{H}$. Soit $(e_n)_{n\in\mathsf{Z}}$ une base hilbertienne de $\mathcal{H}$ et P un opérateur défini sur $\mathcal{H}$. On dit que l'opérateur P est un *opérateur de Hilbert-Schmidt* si la série $\sum_{n\in\mathsf{Z}} \|Pe_n\|^2_{\mathcal{H}}$ est convergente. La fonction

$$P \longmapsto \|P\|_{\mathrm{HS}} = \Big(\sum_{n\in\mathsf{Z}} \|Pe_n\|^2_{\mathcal{H}}\Big)^{1/2}$$

est alors une norme sur l'espace vectoriel des opérateurs de Hilbert-Schmidt. On peut remarquer que si l'on a une autre base hilbertienne $(\widetilde{e}_n)_{n\in\mathsf{Z}}$, alors

$$\|Pe_n\|^2_{\mathcal{H}} = \sum_{p\in\mathsf{Z}} \langle \widetilde{e}_p, Pe_n\rangle^2 \quad \text{et} \quad \|P\|^2_{\mathrm{HS}} = \sum_{n,p\in\mathsf{Z}} \langle \widetilde{e}_p, Pe_n\rangle^2.$$

Proposition 3.1. *Soit P un opérateur de noyau k sur l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathsf{R}^d)$ et tel que $k \in L^2(\mathsf{R}^{2d})$. Alors P est un opérateur de Hilbert-Schmidt et*

$$\|P\|_{\mathrm{HS}} = \|k\|_{L^2(\mathsf{R}^{2d})}.$$

Démonstration. Soit $(e_n)_{n\in\mathsf{Z}}$ une base hilbertienne de $L^2(\mathsf{R}^d)$, on a

$$\|Pe_n\|^2_{L^2} = \int_{\mathsf{R}^{3d}} k(x,y)\overline{k}(x,z)e_n(y)\overline{e}_n(z)dy\,dz\,dx,$$

où l'on a utilisé le théorème de Fubini pour intervertir les ordres d'intégration. En effet, on remarque que pour tout $(x,y,z) \in \mathsf{R}^{3d}$,

$$\big|k(x,y)\overline{k}(x,z)e_n(y)\overline{e}_n(z)\big| \leqslant \frac{1}{2}\big(|e_n(y)|^2|k(x,z)|^2 + |e_n(z)|^2|k(x,y)|^2\big).$$

Comme la fonction $(x,y,z) \mapsto |e_n(y)|^2|k(x,z)|^2$ est une fonction de $L^1(\mathsf{R}^{3d})$ par hypothèse, on en déduit que la fonction $(x,y,z) \mapsto k(x,y)\overline{k}(x,z)e_n(y)\overline{e}_n(z)$ aussi et nous pouvons donc utiliser le théorème de Fubini.

Notons c_n la fonction de $L^2(\mathsf{R}^d)$ définie pour $n \in \mathsf{Z}$ par

$$c_n(x) = \int_{\mathsf{R}^d} \overline{k}(x,z)e_n(z)dz = \langle k(x,\bullet), e_n\rangle.$$

On a donc par le théorème de Fubini

$$\|Pe_n\|_{L^2}^2 = \int_{\mathbb{R}^d} |c_n(x)|^2 dx, \quad \forall n \in \mathbb{Z}.$$

Comme

$$\|k\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})} = \sum_{n\in\mathbb{Z}} \left(\int_{\mathbb{R}^d} |c_n(x)|^2 dx \right) = \int_{\mathbb{R}^d} \left(\sum_{n\in\mathbb{Z}} |c_n(x)|^2 dx \right),$$

on en déduit la convergence de la famille $\sum_{n\in\mathbb{Z}} \|Pe_n\|_{L^2}^2$ et la relation attendue.

Les implications de ce résultat pour les opérateurs pseudo-différentiels sont immédiates.

Corollaire 3.2. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$. Alors l'opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ est un opérateur Hilbert-Schmidt et*

$$\|\mathrm{Op}_\hbar(a)\|_{\mathrm{HS}(L^2(\mathbb{R}^d))} = (2\pi\hbar)^{-d/2} \|a\|_{L^2(\mathbb{R}^{2d})}.$$

Notons que la norme Hilbert-Schmidt de $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ est une fonction non bornée de $\hbar$.

3.2. Rôle de la diagonale dans le noyau d'un opérateur pseudo-différentiel. Une propriété importante des opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques consiste en le fait que l'on peut modifier le noyau en dehors de la diagonale $\{x = y\}$ sans que cela entraîne de modifications de l'opérateur au premier ordre en $\hbar$. Rappelons que si $a \in C_0^\infty$, le noyau de l'opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ est la fonction $k_\hbar$ définie dans (2.1) par

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

Nous allons montrer que la partie la plus importante du noyau $k_\hbar$ d'un opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ réside sur la diagonale $\{x = y\}$.

Proposition 3.3. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$ telle que $\chi(0) = 1$, $\delta > 0$. Soit $P_{\delta,\hbar}$ l'opérateur de noyau*

$$k_{\delta,\hbar}(x, y) = k_\hbar(x, y)\chi\big((x - y)/\delta\big).$$

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

$$\mathrm{Op}_\hbar(a) = P_{\delta,\hbar} + O\big((\hbar/\delta)^{2N}\big).$$

Démonstration. Nous écrivons

$$\mathrm{Op}_\hbar(a) = P_{\delta,\hbar} + R_\hbar$$

où $R_\hbar$ est l'opérateur de noyau $\hbar^{-d} r_\hbar\big(\frac{1}{2}(x+y), \frac{1}{\hbar}(x-y)\big)$ avec

$$r_\hbar(X,v) = \mathcal{F}_\xi^{-1} a(X,v)\,(1-\chi(\hbar v/\delta))\,.$$

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

$$1-\chi(u) = |u|^{2N}\theta_N(u)$$

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

$$\begin{aligned} r_\hbar(X,v) &= (\hbar/\delta)^{2N}\,\mathcal{F}_\xi^{-1} a(X,v)|v|^{2N}\theta_N\,(\hbar v/\delta) \\ &= (\hbar/\delta)^{2N}\,\mathcal{F}_\xi^{-1}(-\Delta_\xi^N a)(X,v)\theta_N\,(\hbar v/\delta)\,, \end{aligned}$$

où l'on a utilisé que pour $j \in \{1,\dots,d\}$,

$$v_j \mathcal{F}_\xi^{-1} a(X,v) = \mathcal{F}_\xi^{-1}(i\partial_{\xi_j} a)(X,v), \quad \forall (X,v) \in \mathsf{R}^{2d}.$$

On obtient

$$\int_{\mathsf{R}^d} \sup_{X\in\mathsf{R}^d} |r_\hbar(X,v)|dv \leqslant (\hbar/\delta)^{2N}\,\|\theta_N\|_{L^\infty(\mathsf{R}^d)} \int \sup_{x\in\mathsf{R}^d} |\mathcal{F}_\xi^{-1}(-\Delta_\xi^N a)(x,v)|dv.$$

On en déduit par le corollaire 2.2

$$\|R_\hbar\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathsf{R}^d))} = O\big(\,(\hbar/\delta)^{2N}\,\big).$$

3.3. Comparaison des différentes quantifications. Nous allons comparer les différentes quantifications introduites au paragraphe 1.3 en analysant les noyaux de ces opérateurs. Il suffit de comparer la quantification de Weyl et la t-quantification pour n'importe quel $t \in]0,1[$.

Proposition 3.4. *Pour $t \in]0,1[$, $a \in C_0^\infty(\mathsf{R}^{2d})$, on a dans $\mathcal{L}(L^2(\mathsf{R}^d))$,*

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

Démonstration. On part du fait que le noyau de $\mathrm{Op}_\hbar^t(a)$ est la fonction

$$\widetilde{k}_{a,t}(x,y) = \hbar^{-d} K_{a,t}\big(\tfrac{1}{2}(x+y), \tfrac{1}{\hbar}(x-y)\big)$$

avec

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

La formule de Taylor avec reste intégral permet d'écrire

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

où $$B_\hbar(X,v) = v\cdot\int_0^1 \mathcal{F}_\xi^{-1}(\nabla_x a)\big(X+\hbar s(t-1/2)v,v\big)ds.$$

Rappelons que si $f\in\mathcal{C}^1(\mathbf{R})$, le gradient de f, noté ∇f, est le vecteur de $\mathbf{R}^d$ de coordonnées $\partial_{x_j} f$, $1\leq j\leq d$. On a donc

$$\mathrm{Op}_\hbar^t(a) = \mathrm{Op}_\hbar(a) + \hbar(t-1/2)R_\hbar,$$

où $R_\hbar$ est l'opérateur de noyau

$$r_\hbar(x,y) = \hbar^{-d}B_\hbar\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\tfrac{1}{\hbar}(x-y)\big).$$

En utilisant

$$v\cdot\mathcal{F}_\xi^{-1}(\nabla_x a)(X,v) = \mathcal{F}_\xi^{-1}(i\nabla_\xi\cdot\nabla_x a)(X,v),\quad \forall (X,v)\in\mathbf{R}^{2d},$$

on obtient

$$B_\hbar(X,v) = \int_0^1 \mathcal{F}_\xi^{-1}(i\nabla_\xi\cdot\nabla_x a)\,(X+\hbar s(t-1/2)v,v)\,ds.$$

Le fait que l'opérateur $R_\hbar$ soit un opérateur borné sur $L^2(\mathbf{R}^d)$, uniformément par rapport à $\hbar$ vient du corollaire 2.2 et de l'estimation

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

4. Calcul symbolique

Dans cette partie nous allons démontrer un certain nombre de formules concernant l'adjoint et la composition d'opérateurs pseudo-différentiels. Ces formules reliant les symboles de ces opérateurs, on parle de calcul symbolique. Nous décrirons ensuite différentes applications de ce calcul dont le théorème d'Egorov qui est évoqué dans le texte de Frédéric Faure et utilisé dans celui de Nalini Anantharaman (ce volume).

4.1. L'algèbre des opérateurs pseudo-différentiels semi-classiques.

Proposition 4.1. *Soit $a, b \in C_0^\infty(\mathsf{R}^{2d})$, alors, dans $\mathcal{L}(L^2(\mathsf{R}^d))$,*

$$\mathrm{Op}_\hbar(a)^* = \mathrm{Op}_\hbar(\overline{a}), \tag{4.1}$$

$$\mathrm{Op}_\hbar(a)\mathrm{Op}_\hbar(b) = \mathrm{Op}_\hbar(ab) + \frac{\hbar}{2i}\,\mathrm{Op}_\hbar\left(\{a,b\}\right) + O(\hbar^2), \tag{4.2}$$

$$[\mathrm{Op}_\hbar(a), \mathrm{Op}_\hbar(b)] = \frac{\hbar}{i}\,\mathrm{Op}_\hbar(\{a,b\}) + O(\hbar^3), \tag{4.3}$$

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

$$\{a,b\} = \nabla_\xi a \cdot \nabla_x b - \nabla_\xi b \cdot \nabla_x a. \tag{4.4}$$

Il est important de remarquer que les formules de composition restent valables si l'un des opérateurs est un opérateur différentiel à coefficients C^∞. Nous verrons aussi dans le cours de la preuve que l'on peut obtenir des formules asymptotiques à tout ordre en $\hbar$.

Enfin, notons qu'avec les autres choix de quantification introduits en section 1.3, on obtient des formules du même type mais elles seront légèrement différentes. En particulier, pour la quantification classique, la formule pour l'adjoint (4.1) présente un développement non trivial en $\hbar$ et la formule sur le commutateur (4.3) présente un terme non nul en $\hbar^2$.

Démonstration. La relation (4.1) est évidente puisque le noyau de l'opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a)^*$ est la fonction $(x,y) \mapsto \overline{k_\hbar}(x,y)$, où $k_\hbar$ est relié à a par (2.1). On a alors

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

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

Étudions maintenant la formule de composition (4.2) : le noyau de $\mathrm{Op}_\hbar(a) \circ \mathrm{Op}_\hbar(b)$ est la fonction $k_\hbar(x,y)$ donnée par

$$\begin{aligned}&k_\hbar(x,y)\\ &= (2\pi\hbar)^{-2d}\int_{\mathsf{R}^{3d}} a\big(\tfrac{1}{2}(x+z),\zeta\big)b\big(\tfrac{1}{2}(y+z),\eta\big)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(x-z)\cdot\zeta+\frac{i}{\hbar}(z-y)\cdot\eta}d\eta\,d\zeta\,dz.\end{aligned}$$

Écrivons $k_\hbar(x,y) = \hbar^{-d} K_\hbar\big((x+y)/2, (x-y)/\hbar\big)$ avec

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

Une formule de Taylor à l'ordre 2 permet d'écrire

$$\begin{aligned} K_\hbar(X,v) &= (2\pi)^{-2d}\int_{\mathbb{R}^{3d}} a(X,\zeta) b(X,\eta) \mathrm{e}^{-i\zeta\cdot(w-v/2)+i\eta\cdot(w+v/2)} d\zeta\, d\eta\, dw \\ &\quad + \frac{\hbar}{2}(2\pi)^{-2d}\int_{\mathbb{R}^{3d}} (w+v/2)\cdot\nabla_x a(X,\zeta) b(X,\eta) \\ &\qquad\qquad \times \mathrm{e}^{-i\zeta\cdot(w-v/2)+i\eta\cdot(w+v/2)} d\zeta\, d\eta\, dw \\ &\quad + \frac{\hbar}{2}(2\pi)^{-2d}\int_{\mathbb{R}^{3d}} a(X,\zeta)\,(w-v/2)\cdot\nabla_x b(X,\eta) \\ &\qquad\qquad \times \mathrm{e}^{-i\zeta\cdot(w-v/2)+i\eta\cdot(w+v/2)} d\zeta\, d\eta\, dw \\ &\quad + \hbar^2 r_\hbar(X,v), \end{aligned} \tag{4.5}$$

où

$$r_\hbar(X,v) = \int_{\mathbb{R}^d} B_\hbar\,(X, w+v/2, -w+v/2)\; dw$$

avec

$$B_\hbar(X,u,u') = \frac{(2\pi)^{-2d}}{2}\sum_{|\alpha|+|\beta|=2}\int_{\mathbb{R}^{2d}}\int_0^1 u^\alpha \partial_x^\alpha a(X+shu,\zeta) \\ \times (u')^\beta \partial_x^\beta b(X+shu',\eta) \mathrm{e}^{i\zeta\cdot u + i\eta\cdot u'} d\zeta\, d\eta\, ds.$$

En utilisant des intégrations par parties en ζ et η, on obtient

$$B_\hbar(X,u,u') = -\frac{(2\pi)^{-2d}}{2}\sum_{|\alpha|+|\beta|=2}\int_{\mathbb{R}^{2d}}\int_0^1 \partial_\zeta^\beta \partial_x^\alpha a(X+shu,\zeta) \\ \times\; \partial_\eta^\alpha \partial_x^\beta b(X+shu',\eta) \mathrm{e}^{i\zeta\cdot u + i\eta\cdot u'} d\zeta\, d\eta\, ds \tag{4.6}$$

et on en déduit que la fonction $(X,u,u') \mapsto B_\hbar(X,u,u')$ est uniformément bornée par rapport à $\hbar$: il existe $C_0 > 0$ tel que

$$\sup_{(x,u,u')\in\mathbb{R}^{3d}} |B_\hbar(X,u,u')| \\ \leqslant C_0 \sup_{|\alpha|+|\beta|=2}\sup_{x\in\mathbb{R}^d} \|\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta a(x,\bullet)\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}\, \|\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta b(x,\bullet)\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}.$$

Le même argument donne :

(4.7) $\forall N \in \mathbb{N}, \quad \exists C_N(a,b) > 0,$

$$\sup_{(x,u,u')\in\mathbb{R}^{3d}} (1+|u|^2)^N(1+|u'|^2)^N |B_\hbar(X,u,u')| \leqslant C_N(a,b)$$

avec

$$C_N(a,b) = \sup_{|\alpha|+|\beta|=2N+2}\ \sup_{x\in\mathbb{R}^d} \|\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta a(x,\bullet)\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}\, \|\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta b(x,\bullet)\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}.$$

Revenons maintenant à la fonction $K_\hbar$: le même type d'intégrations par parties en ζ et η et une intégration en w (qui engendre une masse de Dirac $\delta(\zeta-\eta)$) permet d'écrire

$$K_\hbar(X,v) = K_\hbar^{(1)}(X,v) + \hbar^2 r_\hbar(X,v) \tag{4.8}$$

avec

$$\begin{aligned} K_\hbar^{(1)}(X,v) = (2\pi)^{-d} &\int_{\mathbb{R}^d} a(X,\zeta) b(X,\zeta) \mathrm{e}^{i\zeta\cdot v} d\zeta \\ &- \frac{\hbar}{2i}(2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} \nabla_x a(X,\zeta)\cdot\nabla_\xi b(X,\zeta)\mathrm{e}^{i\zeta\cdot v} d\zeta \\ &+ \frac{\hbar}{2i}(2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} \nabla_\xi a(X,\zeta)\cdot\nabla_x b(X,\zeta)\mathrm{e}^{i\zeta\cdot v} d\zeta. \end{aligned}$$

On remarque alors que la fonction

$$k_\hbar(x,y) = \hbar^{-d} K_\hbar^{(1)}\big(\tfrac{1}{2}(x+y), \tfrac{1}{\hbar}(x-y)\big)$$

est le noyau de l'opérateur

$$\mathrm{Op}_\hbar\Big(ab + \frac{\hbar}{2i}\nabla_\xi a\cdot\nabla_x b - \frac{\hbar}{2i}\nabla_x a\cdot\nabla_\xi b\Big).$$

Par ailleurs, au vu de (4.7), on a

$$\int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X\in\mathbb{R}^d} |r_\hbar(X,v)|\, dv \leqslant \int_{\mathbb{R}^d} \sup_{X\in\mathbb{R}^d} \big|B_\hbar(X,u,u')\big|\, du'\, du \leqslant C,$$

pour une constante C positive. De ce fait, l'opérateur de noyau $\hbar^{-d} r_\hbar\big(\frac{1}{2}(x+y), \frac{1}{\hbar}(x-y)\big)$ est uniformément borné sur $L^2(\mathbb{R}^d)$ par le corollaire 2.2. On déduit alors de l'équation (4.8) que

$$\mathrm{Op}_\hbar(a)\circ\mathrm{Op}_\hbar(b) = \mathrm{Op}_\hbar\Big(ab + \frac{\hbar}{2i}\nabla_\xi a\cdot\nabla_x b - \frac{\hbar}{2i}\nabla_x a\cdot\nabla_\xi b\Big) + O(\hbar^2)$$

dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$.

La formule sur le commutateur (4.3) est une conséquence du calcul précédent. Il faut juste remarquer que les termes d'ordre 2 engendrés par la formule de Taylor dans (4.5) sont symétriques en a et b. En effet

$$\int_{\mathbb{R}^d} B_0\,(X, w+v/2, w-v/2)\,dw$$
$$= \frac{(2\pi)^{-d}}{2} \sum_{|\alpha|+|\beta|=2} \partial_\xi^\beta \partial_x^\alpha a(X,\xi)\,\partial_\xi^\alpha \partial_x^\beta b(X,\xi)\,\mathrm{e}^{i\xi\cdot v}\,d\xi.$$

Ils engendrent donc des contributions identiques dans le développement de $\mathrm{Op}_\hbar(a)\mathrm{Op}_\hbar(b)$ et dans celui de $\mathrm{Op}_\hbar(b)\mathrm{Op}_\hbar(a)$, lesquelles vont s'annuler dans la formule du commutateur.

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

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

4.2. Application 1 : l'approximation semi-classique et le théorème d'Egorov

Venons-en à l'équation de Schrödinger qui décrit l'évolution au cours du temps d'une fonction d'onde $\psi_t^\hbar$:

$$i\hbar\partial_t\psi_t^\hbar = -\frac{h^2}{2}\Delta\psi_t^\hbar + V(x)\psi_t^\hbar, \tag{4.9}$$

avec une donnée initiale $\psi_0^\hbar$. Rappelons que la fonction

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

est appelée le hamiltonien de l'équation. En mettant des hypothèses précises sur V, par exemple en supposant que V est un potentiel C^∞ à croissance au plus quadratique lorsque $\|x\|$ tend vers l'infini, on peut démontrer l'existence d'une unique solution $t \mapsto \psi_t^\hbar$ associée à la donnée $\psi_0^\hbar \in L^2(\mathbb{R}^d)$, et qui est alors une fonction continue du temps à valeurs dans $L^2(\mathbb{R}^d)$. Une façon d'exprimer ce résultat consiste à démontrer que, sous ces hypothèses sur le potentiel, l'opérateur non borné $\mathrm{Op}_\hbar(H)$ est auto-adjoint et à définir son propagateur $U(t)$ grâce au théorème spectral qui sera évoqué dans la section suivante. Soit

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

l'opérateur $U(t)$ est unitaire et vérifie

$$i\hbar \frac{d}{dt} U(t) = \mathrm{Op}_\hbar(H) U(t) = U(t) \mathrm{Op}_\hbar(H), \quad U(0) = \mathrm{id}\,. \tag{4.10}$$

La solution de (4.9) est donc donnée par $\psi_t^\hbar = U(t)\psi_0^\hbar$.

Nous avons aussi vu au paragraphe 1.1 du texte de Frédéric Faure (ce volume, [Fau14]) comment on associe au symbole $H(x, \xi)$ des quantités « classiques » telles que les trajectoires hamiltoniennes

$$\phi_t(x, \xi) = (x(t), \xi(t)) \tag{4.11}$$

où

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

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

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

et dont l'évolution infinitésimale vérifie

$$\frac{d}{dt}(\mathcal{L}_t a) = \{H, \mathcal{L}_t a\}, \tag{4.12}$$

où le crochet de Poisson $\{\bullet, \bullet\}$ a été défini dans (4.4).

Le théorème d'Egorov décrit la conjugaison d'un opérateur pseudo-différentiel semi-classique par le propagateur de Schrödinger. Il relie ainsi l'évolution quantique (le propagateur de Schrödinger) à des quantités classiques (l'opérateur de Liouville) et ce lien est fait à la limite $\hbar \to 0$, appelée « limite semi-classique ». Nous sommes donc au cœur de l'approximation semi-classique qui nous permet de retrouver des équations de la mécanique classique en partant de la mécanique quantique.

Théorème 4.2. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathsf{R}^{2d})$. Pour tout $t \in \mathsf{R}$ on a l'égalité dans $\mathcal{L}(L^2(\mathsf{R}^d))$,*

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

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

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

On a donc

$$A_\hbar(0) = \mathrm{Op}_\hbar(\mathcal{L}_t a) \quad \text{et} \quad A_\hbar(t) = U(-t) \circ \mathrm{Op}_\hbar(a) \circ U(t).$$

En utilisant (4.10) et (4.12), on écrit

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

Compte tenu du calcul symbolique

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

d'où

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

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

Ce théorème permet de décrire la transformée de Wigner au temps t d'une famille de solutions de l'équation de Schrödinger (4.9).

Corollaire 4.3. *Soit $w^\hbar(t)$, la transformée de Wigner de $\psi_t^\hbar$, solution de* (4.9)*. Alors, pour tout $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$,*

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x,\xi)w^\hbar(t,x,\xi)dx\,d\xi = \int_{\mathbb{R}^{2d}}(\mathcal{L}_t a)(x,\xi)w^\hbar(0,x,\xi)dx\,d\xi + O(\hbar^2|t|).$$

En particulier, si $(\psi_0^\hbar)_{\hbar>0}$ a une unique mesure semi-classique μ_0, alors $(\psi_t^\hbar)_{\hbar>0}$ a une unique mesure semi-classique μ_t définie par

$$\forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}, \quad \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x,\xi)d\mu_t(x,\xi) = \int_{\mathbb{R}^{2d}}(\mathcal{L}_t a)(x,\xi)d\mu_0(x,\xi).$$

Le résultat du corollaire 4.3 ouvre la voie au développement de méthodes numériques efficaces pour calculer la transformée de Wigner de la famille $(\psi_t^\hbar)_{\hbar>0}$ en écrivant

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x,\xi)w^\hbar(t,x,\xi)dx\,d\xi \sim \int_{\mathbb{R}^{2d}}(\mathcal{L}_t a)(x,\xi)w^\hbar(0,x,\xi)dx\,d\xi,$$

et il suffit de connaître la transformée de Wigner de la fonction d'onde au temps initial pour la calculer à un instant t donné sans avoir à résoudre numériquement des équations dépendant du paramètre $\hbar$.

En effet, il existe des méthodes efficaces de résolution numérique permettant de calculer les trajectoires hamiltoniennes ϕ_t, et donc l'opérateur de Liouville $\mathcal{L}_t$. Cette méthode est beaucoup moins coûteuse en termes de temps de calcul que la résolution numérique de l'équation de Schrödinger car la présence de $\hbar$ dans (4.9) impose d'utiliser des pas de discrétisation de très petite taille. Des méthodes de ce type ont été développées en particulier dans [LR10, FL12] avec des applications en chimie quantique. On trouvera aussi dans [GL14] des schémas numériques basés sur le théorème d'Egorov et utilisant des termes de correction issus d'une analyse fine du développement asymptotique du commutateur dans le calcul symbolique.

4.3. Application 2 : inégalité de Gårding. L'inégalité de Gårding répond à la question du lien entre la positivité de la fonction a et la positivité de l'opérateur associé. Nous démontrons ici une version faible de l'inégalité de Gårding.

Proposition 4.4. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathsf{R}^{2d})$ tel que $a \geqslant 0$. Alors, pour tout $\delta > 0$, il existe $C_\delta > 0$ tel que pour tout $f \in L^2(\mathsf{R}^d)$,*

$$\langle f, \mathrm{Op}_\hbar(a) f\rangle \geqslant -(\delta + C_\delta \hbar^2)\|f\|^2_{L^2(\mathsf{R}^d)}, \quad \forall f \in L^2(\mathsf{R}^d).$$

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

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

Cette inégalité est connue sous le nom d'inégalité de Fefferman-Phong (cf. [Zwo12] pour une preuve détaillée). Comme nous le verrons ci-dessous, la version faible que nous avons énoncée dans la proposition 4.4 se démontre de façon élémentaire et permet déjà d'obtenir des résultats intéressants à la limite $\hbar \to 0$.

Démonstration. La proposition repose sur l'observation que si $a \geqslant 0$, on peut lui associer une « presque racine carrée » en considérant une fonction $\chi \in C_0^\infty(\mathsf{R}^{2d})$ telle que $\chi = 1$ sur le support de a et en posant pour $\widetilde{\delta} > 0$

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

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

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

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

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

Considérons maintenant $\delta > 0$ et ajustons $\widetilde{\delta}$ de sorte que

$$\widetilde{\delta}\,\|\mathrm{Op}_\hbar(\chi^2(x,\xi))\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leqslant \delta,$$

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

$$\begin{aligned} 0 \leqslant \|\mathrm{Op}_\hbar(b_{\widetilde{\delta}})f\|^2 &= \langle f, \mathrm{Op}_\hbar(b_{\widetilde{\delta}})^*\mathrm{Op}_\hbar(b_\delta)f\rangle \\ &= \langle f, \mathrm{Op}_\hbar(a)f\rangle + \widetilde{\delta}\langle f, \mathrm{Op}_\hbar(\chi^2(x,\xi))f\rangle + O\big(\hbar^2\|f\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)}\big) \\ &\leqslant \langle f, \mathrm{Op}_\hbar(a)f\rangle + \delta\|f\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)} + O\big(\hbar^2\|f\|^2_{L^2(\mathbb{R}^d)}\big). \end{aligned}$$

D'où le résultat.

Un corollaire important de l'inégalité de Gårding est la positivité des limites faibles des transformées de Wigner.

Théorème 4.5. *Soit $(f^\hbar)_{\hbar>0}$ une famille uniformément bornée dans $L^2(\mathbb{R}^d)$, il existe une suite $(\hbar_n)_{n\in\mathbb{N}}$ tendant vers 0 lorsque n tend vers l'infini et une mesure de Radon positive μ telle que*

(4.13)
$$\forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}),\ \langle f^{\hbar_n}, \mathrm{Op}_{\hbar_n}(a)f^{\hbar_n}\rangle \underset{n\to+\infty}{\longrightarrow} \int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x,\xi)d\mu(x,\xi).$$

Toute mesure μ vérifiant (4.13) pour une certaine suite $(\hbar_n)_{n\in\mathbb{N}}$ est appelée mesure de Wigner ou mesure semi-classique de la famille $(f^\hbar)_{\hbar>0}$. Une famille donnée peut donc avoir plusieurs mesures semi-classiques. On remarquera que les suites $(u_\hbar)$ et $(v_\hbar)$ étudiées dans l'introduction admettent chacune une unique mesure semi-classique que l'on notera μ_u et μ_v et qui vérifient pour tout $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$,

$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x,\xi)d\mu_u(x,\xi) = (2\pi)^{-d}\int_{\mathbb{R}^d} a(x_0,\xi)|\widehat{\Phi}(\xi)|^2d\xi$$
$$\int_{\mathbb{R}^{2d}} a(x,\xi)d\mu_v(x,\xi) = \int_{\mathbb{R}^d} a(x,\xi_0)|\Phi(x)|^2dx.$$

Pour chacune de ces deux familles, on voit apparaître les points d'obstruction à la convergence forte dans le support de sa mesure semi-classique. Nous nous concentrons maintenant sur la preuve du théorème 4.5.

Démonstration. La quantité

$$I_\hbar(a) = \langle f^\hbar, \mathrm{Op}_\hbar(a) f^\hbar \rangle$$

étant bornée en $\hbar$ pour toute fonction $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$, on peut en extraire une sous suite convergente $I_{\hbar_{n,a}}(a)$. En considérant une partie dénombrable dense de l'ensemble $C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ et en utilisant un principe d'extraction diagonal, on construit une suite $\hbar_n$ pour laquelle $I_{\hbar_n}(a)$ a une limite pour tout $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$. L'application qui associe à a la limite $I(a)$ de la suite $I_{\hbar_n}(a)$ est une forme linéaire sur $C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ et l'inégalité de Gårding montre que cette forme linéaire est positive.

Par ailleurs, en considérant une fonction $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ telle que $0 \leqslant \chi \leqslant 1$, $\chi(u) = 0$ pour $|u| \geqslant 2$ et $\chi(u) = 1$ pour $|u| \leqslant 1$, on obtient par le lemme de Fatou

$$\forall R > 0, \quad I(1) \leqslant I\big(\chi\big(x^2 + \xi^2/R\big)\big) \leqslant C,$$

où C est une constante strictement positive. On a donc $I(1) < \infty$ et la positivité de I donne

$$\forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}), \quad I\big(\|a\|_{L^\infty(\mathbb{R}^{2d})} - a\big) \geqslant 0,$$

ce qui implique un contrôle de type mesure de la quantité $I(a)$:

$$\forall a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d}), \quad I(a) \leqslant C\,\|a\|_{L^\infty(\mathbb{R}^{2d})}.$$

La forme linéaire I définit donc une mesure de Radon positive μ sur $\mathbb{R}^{2d}$.

L'utilisation des mesures semi-classiques s'est généralisée dans les années 1990 avec les articles [LP93] ou [GL93] (voir aussi [GMMP97]). Leur emploi a permis récemment de montrer d'importants résultats sur la densité de suites de fonctions propres du laplacien sur le tore (cf. [AM14]). En effet, on peut relier les mesures semi-classiques aux limites faibles des densités de probabilité de présence comme le montre la proposition suivante.

Proposition 4.6. *Soit* μ *une mesure semi-classique de la famille* $(f^{\sim})$ *pour la sous-suite* $\sim_n$.

(i) *Pour tout* $\varphi \in C_0^\infty(\mathsf{R}^d)$,

$$\liminf_{n\to+\infty} \int_{\mathsf{R}^d} \varphi(x)|f^{\sim_n}(x)|^2 dx > \int_{\mathsf{R}^{2d}} \varphi(x)\mu(dx,d\xi).$$

(ii) *Si* $(f^{\sim})_{\sim>0}$ *est* $\sim$*-oscillante, c'est-à-dire si*

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

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

$$\liminf_{n\to+\infty} \int_{\mathsf{R}^d} \varphi(x)|f^{\sim_n}(x)|^2 dx = \int_{\mathsf{R}^{2d}} \varphi(x)\mu(dx,d\xi).$$

(iii) *Si* $f^{\sim_n}$ *converge faiblement vers* f *lorsque* n *tend vers* $+\infty$, *c'est-à-dire si elle vérifie*

$$\forall g \in L^2(\mathsf{R}^d), \quad \langle f^{\sim_n}, g\rangle \underset{n\to+\infty}{\longrightarrow} \langle f, g\rangle,$$

alors

$$\forall a \in C_0^\infty(\mathsf{R}^d), \quad \int_{\mathsf{R}^{2d}} a(x,\xi)d\mu(x,\xi) > \int_{\mathsf{R}^d} a(x,0)|f(x)|^2 dx. \tag{4.14}$$

On notera $\delta(\xi)\otimes|f(x)|^2dx$ la mesure définie par le membre de droite de l'équation (4.14).

Démonstration.

(i) On utilise la fonction χ introduite dans la preuve du théorème 4.5. On écrit pour $R>0$,

$$\begin{aligned}\int_{\mathsf{R}^d} \varphi(x)|f^{\sim_n}(x)|^2 dx &> \left\langle f^{\sim_n}, \varphi(x)\chi\left(\sim_n D/R\right) f^{\sim_n}\right\rangle \\ &> \left\langle f^{\sim_n}, \mathrm{Op}_{\sim_n}\left(\varphi(x)\chi\left(\xi/R\right)\right) f^{\sim_n}\right\rangle + O(\sim_n).\end{aligned}$$

En passant à la limite $n\to+\infty$, on obtient pour tout $R>0$,

$$\liminf_{n\to+\infty} \int_{\mathsf{R}^d} \varphi(x)|f^{\sim_n}(x)|^2 dx > \int_{\mathsf{R}^{2d}} \varphi(x)\chi\left(\xi/R\right)\mu(dx,d\xi),$$

d'où le résultat en faisant tendre R vers $+\infty$.

(ii) On remarque que la condition de $\hbar$-oscillation implique que pour la fonction χ précédente, on a

$$\limsup_{n\to+\infty} \left\langle f^{\hbar_n}, \varphi(x)\left(1-\chi\left(\hbar_n D/R\right)\right) f^{\hbar_n} \right\rangle \underset{R\to+\infty}{\longrightarrow} 0.$$

On obtient donc le résultat annoncé en faisant tendre n puis R vers l'infini dans l'égalité

$$\begin{aligned}\int_{\mathsf{R}^d} \varphi(x)|f^{\hbar_n}(x)|^2dx &= \left\langle f^{\hbar_n}, \varphi(x)\chi\left(\hbar_n D/R\right) f^{\hbar_n} \right\rangle \\ &\qquad + \left\langle f^{\hbar_n}, \varphi(x)\left(1-\chi\left(\hbar_n D/R\right)\right) f^{\hbar_n} \right\rangle \\ &= \left\langle f^{\hbar_n}, \mathrm{Op}_{\hbar_n}\left(\varphi(x)\chi\left(\xi/R\right)\right) f^{\hbar_n} \right\rangle + O(\hbar_n) \\ &\qquad + \left\langle f^{\hbar_n}, \varphi(x)\left(1-\chi\left(\hbar_n D/R\right)\right) f^{\hbar_n} \right\rangle\end{aligned}$$

(iii) On pose $g^{\hbar} = f^{\hbar} - f$ et on écrit pour $a \in C_0^\infty(\mathsf{R}^{2d})$,

$$\langle g^{\hbar_n}, \mathrm{Op}_{\hbar_n}(a) g^{\hbar_n}\rangle = (1) + (2) + (3)$$

avec

$$\begin{aligned}(1) &= \langle f^{\hbar_n}, \mathrm{Op}_{\hbar}(a) f^{\hbar_n}\rangle \underset{n\to+\infty}{\longrightarrow} \int_{\mathsf{R}^{2d}} a(x,\xi)\mu(dx,d\xi), \\ (2) &= \langle f, \mathrm{Op}_{\hbar_n}(a) f\rangle - \langle f^{\hbar_n}, \mathrm{Op}_{\hbar_n}(a) f\rangle \underset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0 \\ (3) &= \langle f, \mathrm{Op}_{\hbar_n}(a) f^{\hbar_n}\rangle = \langle \mathrm{Op}_{\hbar_n}(\overline{a}) f, f^{\hbar_n}\rangle + O(\hbar_n) \\ &\qquad\qquad \underset{n\to+\infty}{\longrightarrow} \int_{\mathsf{R}^d}\int a(x,0)|f(x)|^2dx.\end{aligned}$$

On en déduit que la mesure $\mu(x,\xi) - |f(x)|^2dx\otimes\delta(\xi)$ est une mesure semi-classique de la famille $(g^{\hbar})_{\hbar>0}$ et est donc une mesure positive, on en déduit la relation (4.14).

Une application intéressante de la proposition 4.6 est proposée dans l'article [GL93]. Soit $\theta \in L^2(\mathsf{R}^d)$ et S une fonction localement intégrable dont la dérivée au sens des distributions est aussi localement intégrable. On suppose que $dS \neq 0$ presque partout, alors on peut montrer que la suite $f^{\hbar}(x) = \mathrm{e}^{iS(x)/\hbar}\theta(x)$ converge faiblement vers 0 lorsque $\hbar$ tend vers 0. La preuve de [GL93] consiste à étudier la transformée de Wigner de la famille $(f^{\hbar})_{\hbar>0}$, et à démontrer que l'unique mesure semi-classique de cette famille est

$$\mu(x,\xi) = |\theta(x)|^2 dx \otimes \delta(\xi - dS(x)).$$

Une fois démontré que la famille $(f^{\sim})_{\sim>0}$ est ~-oscillante, le résultat (iii) de la proposition 4.6 implique que toute limite faible de $(f^{\sim})_{\sim>0}$ est nulle sous la condition $dS \neq 0$ presque partout. C'est une preuve relativement simple d'un résultat que la faible régularité supposée sur la fonction S rend difficile à démontrer. Nous renvoyons le lecteur intéressé à l'article [GL93].

4.4. Application 3 : calcul fonctionnel. Notre deuxième application du calcul symbolique concerne le calcul fonctionnel qui permet d'associer à certains opérateurs P un autre opérateur $\varphi(A)$ obtenu comme « fonction » de P par une fonction continue φ. Une fois établi un tel processus, et dans le cas où P est un opérateur pseudo-différentiel, on peut se demander s'il en est de même de l'opérateur $\varphi(P)$.

Rappelons qu'un opérateur P défini sur un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ est dit auto-adjoint s'il est égal à son adjoint, $P = P^*$. Un tel opérateur a un spectre réel :

$$\mathrm{sp}(P) = \{\lambda \in \mathsf{C} \mid P - \lambda\,\mathrm{id} \text{ est inversible}\} \subset \mathsf{R}.$$

Pour les opérateurs auto-adjoints, il existe un théorème spectral qui joue le rôle du théorème de diagonalisation des matrices hermitiennes. Ce théorème permet de décrire un opérateur auto-adjoint P grâce à une mesure $E(\lambda)$ sur R supportée par le spectre de P et appelée mesure spectrale de P, et à une famille de projecteurs $R(\lambda)$, appelés projecteurs spectraux. On écrit

$$P = \int_{\mathsf{R}} \lambda\, dE(\lambda) R(\lambda)$$

et on a alors

$$\forall f \in L^2(\mathsf{R}^d), \quad Pf = \int_{\mathsf{R}} R(\lambda) f \lambda dE(\lambda).$$

Dans le cas de l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = \mathsf{C}^d$, un opérateur auto-adjoint est donné par une matrice hermitienne A et la mesure $E(\lambda)$ est déterminée par les k valeurs propres distinctes de A, $\lambda_1 < \cdots < \lambda_k$:

$$E(\lambda) = \sum_{1\leqslant j\leqslant k} \delta(\lambda - \lambda_j),$$

et, pour $j \in \{1, \ldots, k\}$, le projecteur $R(\lambda_j)$ n'est rien d'autre que le projecteur sur le sous-espace propre associé à λ_j. Dans le cas général, la structure de la mesure $E(\lambda)$ est plus compliquée.

Toujours dans le cas $\mathcal{H} = \mathbb{C}^d$, si F est une fonction continue sur $\mathbb{R}$ et à valeurs dans $\mathbb{C}$, on définit la matrice $F(A)$ par

$$F(A) = \sum_{1\leqslant j\leqslant k} F(\lambda_j) R(\lambda_j).$$

De même, dans le cas général, on définit l'opérateur $F(P)$ par la formule

$$F(P) = \int_{\mathbb{R}} F(\lambda) R(\lambda) dE(\lambda).$$

Nous renvoyons au livre [Dav95] pour une présentation du calcul fonctionnel pour les opérateurs auto-adjoints.

Nous avons vu dans la section précédente que, lorsque le symbole a est à valeurs réelles, l'opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ est un opérateur auto-adjoint. Il est donc légitime de se demander ce qui reste de la nature pseudo-différentielle de l'opérateur, une fois qu'on l'a transformé par le calcul fonctionnel. C'est à cette question que répond le théorème suivant.

Théorème 4.7. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ à valeurs réelles et $F \in C_0^\infty(\mathbb{R})$. Soit $F(\mathrm{Op}_\hbar(a))$ l'opérateur associé par le calcul fonctionnel. Alors dans $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$*

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

Ce théorème repose sur la formule de Helffer-Sjöstrand qui sera décrite dans la proposition 4.8 ci-dessous. L'idée sous-jacente à cette formule consiste à étendre la fonction F en une fonction $\widetilde{F}$ définie sur le plan complexe et comportant de bonnes propriétés. Par là, on pense bien entendu au fait d'admettre des dérivées partielles en x ou en y, mais aussi à des propriétés liées à la structure complexe. Rappelons qu'à une fonction d'une variable complexe $\widetilde{F}$, on associe

$$\frac{\partial \widetilde{F}}{\partial \overline{z}} := \frac{1}{2}\Big(\frac{\partial \widetilde{F}}{\partial x} + i\frac{\partial \widetilde{F}}{\partial y}\Big).$$

Une fonction $\widetilde{F}$ qui est une fonction de $C^1(\mathbb{R}^2)$ en tant que fonction des variables x et y et qui vérifie $\partial\widetilde{F}/\partial\overline{z} = 0$ est dite holomorphe, elle est alors analytique. On va donc chercher à étendre F au plan complexe en étant compatible autant que possible avec cette structure analytique. Comme on va construire un prolongement à support compact et qu'il n'existe pas de fonctions analytiques à support compact autres que la fonction nulle, ce prolongement $\widetilde{F}$ sera appelé prolongement presque analytique au sens où $\partial\widetilde{F}/\partial\overline{z}$ s'annulera sur la droite réelle à un ordre aussi élevé que souhaité. Plus précisément, on démontre la proposition qui suit.

Proposition 4.8 **(**[HS89] **et** [Dav95]**)**. *Soit $F \in C_0^\infty(\mathbb{R})$. Pour tout $N_0 \in \mathbb{N}$, il existe un prolongement presque analytique, c'est-à-dire une fonction $\widetilde{F} \in C_0^\infty(\mathbb{C})$ coïncidant avec F sur $\mathbb{R}$ et telle que l'on ait l'estimation*

$$\forall z \in \mathbb{C}, \quad \left|\frac{\partial}{\partial\overline{z}}\widetilde{F}(z)\right| \leqslant C\,|\operatorname{Im}(z)|^{N_0}, \tag{4.15}$$

et l'égalité

$$\forall \lambda \in \mathbb{R}, \quad F(\lambda) = -\frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} \frac{\partial}{\partial\overline{z}}\,\widetilde{F}(z)(\lambda - z)^{-1}\,dz, \tag{4.16}$$

où dz est la mesure de Lebesgue sur $\mathbb{C}$ ($dz = dxdy$ où $z = x + iy$).

La formule (4.16) est appelée formule de Helffer-Sjöstrand. Nous renvoyons à la fin de ce paragraphe pour la preuve de la proposition 4.8 et la construction de $\widetilde{F}$ et démontrons maintenant le théorème 4.7.

Démonstration. Soit maintenant $a \in C_0^\infty(\mathbb{R}^{2d})$ à valeurs réelles. L'opérateur $\operatorname{Op}_\hbar(a)$ est alors auto-adjoint par (4.1) et, par le théorème spectral ainsi que la formule (4.17), on peut écrire

$$F(\operatorname{Op}_\hbar(a)) = -\frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}} \frac{\partial}{\partial\overline{z}}\,\widetilde{F}(z)\,(\operatorname{Op}_\hbar(a) - z)^{-1}\ dz. \tag{4.17}$$

En effet, si $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$, l'opérateur $\operatorname{Op}_\hbar(a) - z$ est inversible et la norme de la résolvante $(\operatorname{Op}_\hbar(a) - z)^{-1}$ est contrôlée par la distance de z au spectre qui est inclus dans $\mathbb{R}$:

$$\exists C > 0, \quad \|(\operatorname{Op}_\hbar(a) - z)^{-1}\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))} \leqslant C\,|\operatorname{Im}(z)|^{-1}. \tag{4.18}$$

En choisissant N_0 suffisamment grand dans (4.15), l'intégrale (4.17) est bien définie.

Nous allons maintenant utiliser les formules de calcul symbolique. Pour deux symboles b_1 et b_2, on a

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

avec

$$\begin{aligned}&\|R_\hbar\|_{\mathcal{L}(L^2)} \\ &\quad \leq C \Big(\sup_{|\beta| \leq N} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \|\partial_\xi^\beta b_1(x, \bullet)\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} \Big) \Big(\sup_{|\beta| \leq N} \sup_{x \in \mathbb{R}^d} \|\partial_\xi^\beta b_2(x, \bullet)\|_{L^1(\mathbb{R}^d)} \Big)\end{aligned}$$

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

$$\mathrm{Op}_\hbar(a-z)\mathrm{Op}_\hbar\big((a-z)^{-1}\big) = \mathrm{Op}_\hbar(1) + \hbar R_\hbar = \mathrm{id} + \hbar R_\hbar,$$

avec $\|R_\hbar\|_{\mathcal{L}(L^2)} \leq |\operatorname{Im}(z)|^{-N_1}$ pour un certain $N_1 \in \mathbb{N}$. En conjuguant cette équation par la résolvante $(\mathrm{Op}_\hbar(a) - z)^{-1}$, on en déduit grâce à (4.18)

$$\mathrm{Op}_\hbar\big((a-z)^{-1}\big) = (\mathrm{Op}_\hbar(a) - z)^{-1} + \hbar \widetilde{R}_\hbar = (\mathrm{Op}_\hbar(a-z))^{-1} + \hbar \widetilde{R}_\hbar,$$

avec $\|\widetilde{R}_\hbar\|_{\mathcal{L}(L^2)} \leq C|\operatorname{Im}(z)|^{-N_1-1}$. En choisissant $N_0 > N_1$ dans (4.15), la formule d'Helffer-Sjöstrand (4.17) donne alors

$$\begin{aligned} F(\mathrm{Op}_\hbar(a)) &= -\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \widetilde{F}(z)\, \mathrm{Op}_\hbar\big((a-z)^{-1}\big)\, dz + O(\hbar) \\ &= \mathrm{Op}_\hbar\Big(-\frac{1}{\pi} \int_{\mathbb{C}} \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \widetilde{F}(z)(a-z)^{-1}\, dz \Big) + O(\hbar) \\ &= \mathrm{Op}_\hbar\left(F(a)\right) + O(\hbar). \end{aligned}$$

Il reste à démontrer la proposition 4.8.

Démonstration. Soit $\widetilde{F}$, la fonction de $\mathbb{C}$ dans $\mathbb{C}$ définie par

$$\forall (x,y) \in \mathbb{R}^2, \quad \widetilde{F}(x+iy) = \Big(\sum_{k=0}^{N_0} F^{(k)}(x) \frac{(iy)^k}{k!} \Big) \chi(x,y) \tag{4.19}$$

où $\chi(x,y) = \theta\left(y/\sqrt{1+x^2}\right)$ pour une fonction θ, paire, qui vaut 1 sur $[-1,1]$ et 0 sur l'intervalle $]-\infty,-2]\cup[2,+\infty[$. On remarquera que

$$\frac{\partial \widetilde{F}}{\partial \overline{z}} = \frac{1}{2}\left(\sum_{k=0}^{N_0} F^{(k)}(x)\frac{(iy)^k}{k!}\right)(\partial_x\chi + i\partial_y\chi) + \frac{1}{2}F^{(N_0+1)}(x)\frac{(iy)^n}{n!}\chi.$$

On en déduit que lorsque $y\to 0$, pour tout $x\in\mathbb{R}$,

$$\left|\frac{\partial}{\partial\overline{z}}\widetilde{F}(x+iy)\right| = O(|y|^{N_0}),$$

d'où le nom de prolongement presque analytique, puisqu'il est « analytique » ($\partial_{\overline{z}}\widetilde{F}=0$) sur la droite réelle.

Il reste à vérifier que la fonction $\widetilde{F}$ vérifie bien l'équation (4.16). Pour cela, on va utiliser un domaine auxiliaire. On choisit $C>0$ tel que

$$\operatorname{supp}(\widetilde{F}) \subset \{z = x+iy \in \mathbb{C} \mid |x| \leqslant C,\ |y| \leqslant C\}$$

et on définit Ω_δ pour $\delta>0$ par

$$\Omega_\delta = \{z = x+iy\in\mathbb{C} \mid |x|\leqslant C,\ \delta<|y|<C\}.$$

On a alors

$$-\frac{1}{\pi}\int_{\mathbb{C}}\frac{\partial}{\partial\overline{z}}\widetilde{F}(z)(\lambda-z)^{-1}\,dz, = -\frac{1}{\pi}\lim_{\delta\to 0}\int_{\Omega_\delta}\frac{\partial}{\partial\overline{z}}\widetilde{F}(z)(\lambda-z)^{-1}\,dz.$$

Par ailleurs, en remarquant que $\partial\Omega_\delta$ ne rencontre le support de $\widetilde{F}$ que le long de deux segments, la formule de Stokes nous donne

$$\begin{aligned}&-\frac{1}{\pi}\int_{\Omega_\delta}\frac{\partial}{\partial\overline{z}}\widetilde{F}(z)(\lambda-z)^{-1}\,dz\\ &= \frac{i}{2\pi}\int_{-N}^{+N}\Big(\widetilde{F}(x+i\delta)(\lambda-x-i\delta)^{-1} - \widetilde{F}(x-i\delta)(\lambda-x+i\delta)^{-1}\Big)dx,\end{aligned}$$

pour un certain $N\in\mathbb{R}^+$ qui peut être pris de sorte que $|\lambda|<N$. Lorsque l'on remplace $\widetilde{F}$ par l'expression (4.19), on voit apparaître la somme de trois termes

$$-\frac{1}{\pi}\int_{\Omega_\delta}\frac{\partial}{\partial\overline{z}}\widetilde{F}(z)(\lambda-z)^{-1}\,\mathrm{d}L(z) = A_{\delta,0}+A_{\delta,1}+A_{\delta,2}$$

où, pour $j \in \{0,1,2\}$,

$$A_{\delta,j} = \frac{i}{2\pi}\int_{-N}^{+N}\Big[(G_j(x+i\delta)(x+i\delta-\lambda)^{-1} - G_j(x-i\delta)(x-i\delta-\lambda)^{-1}\Big]dx$$

avec pour tout $(x,y) \in \mathrm{R}^2$,

$$\begin{aligned}
G_0(x+iy) &= F(x)\chi(x,y),\\
G_1(x+iy) &= iyF'(x)\chi(x,y),\\
G_2(x+iy) &= O(|y|^2).
\end{aligned}$$

L'équation (4.16) vient alors de l'observation.

$$A_{\delta,0} \underset{\delta\to 0}{\longrightarrow} F(\lambda), \quad A_{\delta,1} \underset{\delta\to 0}{\longrightarrow} 0, \quad A_{\delta,2} \underset{\delta\to 0}{\longrightarrow} 0.$$

La preuve de ces trois limites conclut donc la démonstration de la proposition 4.8.

Il s'agit là de trois estimations élémentaires. Remarquons tout d'abord qu'il existe une constante C_2 telle que

$$|A_{\delta,2}| \leqslant \frac{C_2}{\delta}\int_{-N}^{+N}\left(|G_2(x+i\delta)| + |G_2(x-i\delta)|\right)dx \leqslant 4N\,C_2\,\delta.$$

Par ailleurs, la fonction θ ayant été choisie paire, on peut écrire

$$\begin{aligned}
|A_{\delta,1}| &= \left|\frac{\delta}{\pi}\int_{-N}^{+N} F'(x)\theta\Big(\frac{\delta}{\sqrt{1+x^2}}\Big)\frac{x-\lambda}{\delta^2+(x-\lambda)^2}dx\right|\\
&\leqslant \frac{\delta}{\pi}\sup_{[-N,N]}|F'|\sup_{\mathrm{R}}|\theta|\int_{\frac{-N-\lambda}{\delta}}^{\frac{N-\lambda}{\delta}}\frac{u}{1+u^2}du\\
&\leqslant \frac{\delta}{2\pi}\sup_{[-N,N]}|F'|\sup_{\mathrm{R}}|\theta|\log\Big(\frac{(N-\lambda)^2+\delta^2}{(N+\lambda)^2+\delta^2}\Big),
\end{aligned}$$

ce qui donne la convergence vers 0 de $A_{\delta,1}$ lorsque δ tend vers 0. Enfin, toujours en utilisant la parité de θ, on écrit

$$\begin{aligned}
A_{\delta,0} &= \frac{1}{\pi}\int_{-N}^{+N} F(x)\frac{\delta}{(x-\lambda)^2+\delta^2}\theta\Big(\frac{\delta}{\sqrt{1+x^2}}\Big)dx\\
&= \frac{1}{\pi}\int_{\frac{-N-\lambda}{\delta}}^{\frac{N-\lambda}{\delta}} F(\lambda+\delta u)\chi\Big(\frac{\delta}{\sqrt{1+(\lambda+\delta u)^2}}\Big)\frac{du}{1+u^2}
\end{aligned}$$

On a donc

$$A_{\delta,0} \underset{\delta\to 0}{\longrightarrow} \frac{1}{\pi} F(\lambda)\,\chi(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{du}{1+u^2} = F(\lambda),$$

ce qui conclut la preuve.

5. Opérateurs pseudo-différentiels sur une variété

Avant d'esquisser la manière dont on étend la notion d'opérateurs pseudo-différentiels au cas d'une variété, nous commencerons par étudier la transformation d'un opérateur pseudo-différentiel semi-classique par changement de variable. Cela nous permettra de mieux comprendre la nature géométrique de l'espace des phases et de pouvoir étendre ce calcul au cas des variétés.

5.1. Opérateurs pseudo-différentiels et changement de variables

Soit κ un C^1 difféomorphisme d'un voisinage U de $x_0 \in \mathbf{R}^d$ dans un voisinage V de $0 \in \mathbf{R}^d$. Si $x \in U$, $\kappa(x)$ est un vecteur de $\mathbf{R}^d$, $\kappa(x) = (\kappa_1(x), \dots, \kappa_d(x))$. On notera abusivement $\nabla\kappa$ la matrice dont les lignes sont les vecteurs $\nabla\kappa_i$, c'est-à-dire la matrice de coefficient $i$ème ligne, j-ème colonne $\partial\kappa_i/\partial x_j(x)$. Comme κ est un difféomorphisme local, cette matrice est inversible pour tout $x \in U$.

Si f est une fonction à support dans U, on lui associe $\kappa_* f$ à support dans V définie par

$$\kappa_* f = f \circ \kappa^{-1}.$$

L'application κ_* ainsi définie admet comme inverse κ^*, définie par $\kappa^* f = f \circ \kappa$.

Proposition 5.1. *Pour tout $a \in C_0^\infty(V \times \mathbf{R}^d)$, on a*

$$\|\kappa^* \mathrm{Op}_\hbar(a) \kappa_* - \mathrm{Op}_\hbar(a \circ (T^*\kappa))\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathbf{R}^d))} = O(\hbar),$$

avec

$$(T^*\kappa)(x,\xi) = \left(\kappa(x),\, {}^t\nabla\kappa(x)^{-1}\xi\right). \tag{5.1}$$

Démonstration. On remarque que si f est à support dans V,

$$\kappa^*\mathrm{Op}_\hbar(a)\kappa_* f(x) = (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^{2d}} a\big(\tfrac{1}{2}(\kappa(x)+z),\xi\big)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(\kappa(x)-z)} f\circ\kappa^{-1}(z)\,dz\,d\xi.$$

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

(5.2)
$$k_\hbar(x,y) = (2\pi\hbar)^{-d}\int_{\mathbb{R}^d} a\big(\tfrac{1}{2}(\kappa(x)+\kappa(y)),\xi\big)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(\kappa(x)-\kappa(y))} J_\kappa(y)\,d\xi,$$

où J_κ est le jacobien du changement de variable,

$$J_\kappa(y) = \left|\det\left(\nabla\kappa(y)\right)\right|.$$

Écrivons

(5.3)
$$k_\hbar(x,y) = \hbar^{-d} K_\hbar\big(\tfrac{1}{2}(x+y),\tfrac{1}{\hbar}(x-y)\big)$$

avec

$$K_\hbar(X,v) = (2\pi)^{-d}\int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(\kappa(X+\hbar v/2)-\kappa(X-\hbar v/2))} \times\, a\Big(\tfrac{1}{2}(\kappa(X+\hbar v/2)+\kappa(X-\hbar v/2)),\xi\Big) J_\kappa(X+\hbar v/2)\,d\xi.$$

Ici encore, nous allons utiliser des formules de Taylor. Une formule de Taylor à l'ordre 1 avec reste intégral permet d'écrire

$$J_\kappa(X+\hbar v/2) = J_\kappa(X) + \hbar A(X,\hbar v)\cdot v$$

où A est une fonction sur $\mathbb{R}^{2d}$ à valeurs dans $\mathbb{R}^d$ dont les d composantes sont indéfiniment dérivable, bornées ainsi que toutes leurs dérivées partielles, uniformément par rapport à $\hbar\in\,]0,1]$. La formule de Taylor à l'ordre 2 avec reste intégral donne

$$\kappa(X+\hbar v/2)+\kappa(X-\hbar v/2) = 2\kappa(X) + \hbar^2 B(X,\hbar v)v\cdot v,$$

où B est une fonction sur $\mathbb{R}^{2d}$ à valeurs dans les matrices $d\times d$ dont les coefficients sont indéfiniment dérivables, bornés ainsi que leurs dérivées partielles, uniformément par rapport à $\hbar\in\,]0,1]$. Enfin, en faisant deux formules de Taylor, l'une à l'ordre 3 et l'autre à l'ordre 1, on obtient

$$\kappa(X+\hbar v/2)-\kappa(X-\hbar v/2) = \hbar\,\nabla\kappa(X)\cdot v + \hbar^3 C(x,\hbar v)[v,v,v],$$
$$\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot\left(\kappa\left(X+\frac{\hbar}{2}v\right)-\kappa\left(X-\frac{\hbar}{2}v\right)\right)} = \mathrm{e}^{i\xi\cdot(\nabla\kappa(X)v)}(1+\hbar^2\xi\cdot D(X,\hbar v)[v,v,v]),$$

où les fonctions C et D sont définies sur $\mathbb{R}^{2d}$ et à valeurs dans l'ensemble des formes trilinéaires sur $\mathbb{R}^d$ (on note $\phi[v_1, v_2, v_3]$ l'action sur le vecteur $(v_1, v_2, v_3) \in (\mathbb{R}^d)^3$ de la forme trilinéaire ϕ). De plus ces fonctions C et D sont C^∞, bornées ainsi que leurs dérivées partielles, uniformément par rapport à $\hbar \in]0,1]$. On peut donc transformer $K_\hbar$ de la façon suivante

$$K_\hbar(X,v) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{e}^{i\xi\cdot(\nabla\kappa(X)v)} a\left(\kappa(X), \xi\right) J_\kappa(X) d\xi + \hbar R_\hbar(X,v),$$

avec

$$R_\hbar(X,v) = \sum_{|\alpha| \leqslant 3} \int \mathrm{e}^{i\xi\cdot(\nabla\kappa(X)v)} \Theta_{\alpha,h}(X,\xi,\hbar v) v^\alpha d\xi$$

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

$$K_\hbar(X,v) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{e}^{i\,{}^t\nabla\kappa(X)\xi\cdot v} a\left(\kappa(X), \xi\right) J_\kappa(X) d\xi + \hbar\, R_\hbar(X,v).$$

Puis, on fait le changement de variables $\xi \mapsto {}^t\nabla\kappa(X)^{-1}\xi$, ce qui donne

$$K_\hbar(X,v) = (2\pi)^{-d} \int_{\mathbb{R}^d} \mathrm{e}^{i\xi\cdot v} a\left(\kappa(X), {}^t\nabla\kappa(X)^{-1}\xi\right) d\xi + \hbar\, R_\hbar(X,v).$$

On va maintenant travailler la fonction $R_\hbar$ en utilisant à nouveau des intégrations par parties pour transformer les puissances de v en dérivées en ξ ; dans le pire des cas, il faut faire trois intégrations par parties successives et on obtient

$$\begin{aligned} &R_\hbar(X,v) \\ &= \sum_{|\alpha| \leqslant 3} \int \mathrm{e}^{i\xi\cdot v} (-i\nabla\kappa(X)^{-1}\partial_\xi)^\alpha \Theta_{\alpha,\hbar}(X, {}^t\nabla\kappa(X)^{-1}\xi, \hbar v) J_\kappa(X)^{-1} d\xi. \end{aligned}$$

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

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

L'opérateur de noyau $(x,y) \mapsto \hbar^{-d} R_\hbar\left(\frac{1}{2}(x+y), \frac{1}{\hbar}(x-y)\right)$ est donc, par le résultat du corollaire 2.2, uniformément borné sur $\mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}^d))$.

Par ailleurs, au vu des équations (5.2) et (5.3), on en déduit

$$k_\hbar(x,y) = \widetilde{k}_\hbar(x,y) + \hbar^{-d+1} R_\hbar\left(\tfrac{1}{2}(x+y), \tfrac{1}{\hbar}(x-y)\right)$$

avec

$$\widetilde{k}_\hbar(x,y) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathsf{R}^d} \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} a\Big(\kappa(\tfrac{1}{2}(x+y)), {}^t\nabla\kappa(\tfrac{1}{2}(x+y))^{-1}\xi\Big) d\xi.$$

Les opérateurs de noyau $k_\hbar(x,y)$ et $\widetilde{k}_\hbar(x,y)$ sont donc égaux à $O(\hbar)$ près dans $\mathcal{L}(L^2(\mathsf{R}^d))$. Or la fonction $\widetilde{k}_\hbar(x,y)$ est le noyau de l'opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a_\kappa)$. Les opérateurs $\kappa^*\mathrm{Op}_\hbar(a)\kappa_*$ et $\mathrm{Op}_\hbar(a_\kappa)$ diffèrent donc de $O(\hbar)$ dans $\mathcal{L}(L^2(\mathsf{R}^d))$.

5.2. Opérateurs pseudo-différentiels sur une variété et nature géométrique de l'espace des phases. Le résultat de la section 5.1 va permettre de définir les opérateurs pseudo-différentiels sur une variété M. Rappelons que lorsque M est une sous variété de R^d, il existe une famille d'homéomorphismes $\mathcal{G}$ dont les éléments γ envoient des ouverts U_γ de M sur des ouverts V_γ de R^d avec les deux propriétés suivantes :

(1) Les ouverts U_γ recouvrent M, $M = \bigcup_{\gamma\in\mathcal{G}} U_\gamma$,

(2) Les recouvrements sont réguliers : si $\gamma_1, \gamma_2 \in \mathcal{G}$, alors $\gamma_2 \circ \gamma_1^{-1}$ est une application C^∞ de $\gamma_1(U_{\gamma_1} \cap U_{\gamma_2})$ dans $\gamma_2(U_{\gamma_1} \cap U_{\gamma_2})$.

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

Ce sont ces cartes locales qui permettent de définir des fonctions C^∞ sur la variété M. Une fonction f de M dans R^k, $k \in \mathsf{N}$, est dite C^∞ si pour tout $\gamma \in \mathcal{G}$, la fonction $f_{|U_\gamma} \circ \gamma^{-1}$ est une fonction C^∞ de V_γ dans R^k.

Nous allons définir deux fibrés vectoriels au-dessus de M : le fibré tangent à M que l'on note TM et le fibré cotangent à M que l'on note T^*M. Le fibré TM est la collection des espaces tangents T_xM aux points $x \in M$ et le fibré T^*M est la collection des espaces T_x^*M qui sont les espaces duaux des espaces T_xM, c'est-à-dire les espaces des formes linéaires sur T_xM.

Si κ est un C^1 difféomorphisme local de M, il induit une application $T\kappa$ de TM dans lui-même et une application $T^*\kappa$ de T^*M dans lui-même définies comme suit : notons z les éléments de T_xM et ξ ceux de T_x^*M, on a

$$T_x\kappa : T_xM \longrightarrow T_{\kappa(x)}M, \quad z \longmapsto \nabla\kappa(x)z,$$

et
$$T_x^*\kappa : T_x^*M \longrightarrow T_{\kappa(x)}^*M, \quad \xi \longmapsto {}^t\nabla\kappa(x)^{-1}\xi.$$

On remarque que l'on a

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

Ces notions sont triviales lorsque $M = \mathbf{R}^d$ mais il est intéressant de remarquer que les règles de transformation du symbole d'un opérateur pseudo-différentiel par changement de variable énoncées en (5.1) dans la proposition 5.1 montrent que le symbole définit une fonction de l'espace cotangent de $\mathbf{R}^d$. C'est cette remarque fondamentale qui permet de définir les opérateurs pseudo-différentiels sur M en prenant pour ensemble de symboles des fonctions à support compact dans T^*M. En utilisant les cartes locales, on transporte sur la variété M la notion d'opérateur pseudo-différentiel définie sur $\mathbf{R}^d$. La règle de transformation par changement de variable permet alors de recoller les définitions à l'intersection de deux cartes au premier ordre en $\hbar$. Ces opérateurs sont donc définis modulo des restes de taille $O(\hbar)$.

Il faut noter que les résultats de calcul symbolique (adjoint, composition), ainsi que ceux concernant le calcul fonctionnel restent valables dans le cadre du calcul pseudo-différentiel semi-classique sur une variété. Il en est de même pour le théorème d'Egorov (théorème 4.2) et ce résultat sera utilisé dans le texte de Nalini Anantharaman (ce volume, [Ana14]). Néanmoins, la dépendance temporelle du reste dans le théorème d'Egorov peut différer du cas euclidien et est fortement reliée à la structure géométrique de la variété M ; il peut par exemple être exponentiellement grand, en $O(\hbar \mathrm{e}^{\lambda t})$ pour un certain $\lambda > 0$.

Nous terminons ce paragraphe par une remarque sur la structure géométrique de l'espace des phases. Il est usuel de munir l'espace

cotangent $T^*\mathsf{R}^d$ d'une structure d'espace symplectique par la 2-forme
$$\omega = d\xi \wedge dx = \sum_{1\leqslant i\leqslant d} d\xi_i \wedge dx_i.$$
Une bonne transformation de l'espace des phases est une transformation qui préserve cette structure symplectique. De telles transformations sont appelées transformations symplectiques ou encore transformations canoniques. On peut vérifier que l'application $T^*\kappa$ définie par (cf. équation (5.1))
$$T^*\kappa : (x,\xi) \longmapsto \big(\kappa(x),\, {}^t\nabla\kappa(x)^{-1}\xi\big)$$
est une transformation canonique. Il en est de même pour l'application
$$(x,\xi) \longmapsto \phi_t(x,\xi)$$
définie en (4.11) du paragraphe 3.3 donnée par le flot hamiltonien associé au symbole de l'opérateur de Schrödinger.

6. Opérateurs pseudo-différentiels sur le tore

Dans ce dernier paragraphe, nous allons définir les opérateurs pseudo-différentiels sur le tore et décrire des propriétés de ces opérateurs qui sont utilisées dans le texte de Nalini Anantharaman (ce volume, [Ana14]).

6.1. Définition. Rappelons que le tore en dimension d est le groupe T^d défini comme le quotient
$$\mathsf{T}^d = \mathsf{R}^d \smallsetminus (2\pi\mathsf{Z})^d,$$
c'est-à-dire l'ensemble des classes d'équivalence pour la relation : $x\mathcal{R}y$ si et seulement si $x-y \in (2\pi\mathsf{Z})^d$, muni de la loi induite par l'addition sur R^d. Il existe donc une projection naturelle (qui est un morphisme de groupe)
$$\pi : \mathsf{R}^d \longrightarrow T^d$$
qui associe à tout réel sa classe d'équivalence dans le tore T^d.

À une fonction f définie sur le tore T^d, on associe la fonction $f\circ\pi$ qui est une fonction $(2\pi\mathsf{Z})^d$-périodique sur R^d. Réciproquement, une fonction $(2\pi\mathsf{Z})^d$ périodique sur R^d définit naturellement une fonction sur le tore T^d. L'ensemble des fonctions sur T^d est donc en bijection avec l'ensemble des fonctions $(2\pi\mathsf{Z})^d$-périodiques sur R^d. Dans la suite nous utiliserons cette bijection et identifierons les fonctions sur T^d avec les fonctions $(2\pi\mathsf{Z})^d$-périodiques.

Considérons maintenant un observable a, c'est-à-dire une fonction sur l'espace cotangent du tore $T^*\mathsf{T}^d = \mathsf{T}^d \times \mathsf{R}^d$ et notons encore une fois $k_\hbar(x,y)$ la fonction définie pour $x, y \in \mathsf{R}^d$ par

$$k_h(x,y) = (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathsf{R}^d} a\big(\tfrac{1}{2}(x+y), \xi\big) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}\xi\cdot(x-y)} d\xi. \tag{6.1}$$

Remarquons que la fonction a étant à support compact en ξ et du fait de l'identification ci-dessus, la fonction $k_\hbar$ est bien définie et vérifie

$$\forall x, y \in \mathsf{R}^d, \quad \forall n \in (2\pi\mathsf{Z})^d, \quad k_\hbar(x,y) = k_\hbar(x+n, y+n). \tag{6.2}$$

On définit alors l'opérateur pseudo-différentiel de symbole a par son action sur les fonctions $f \in C^0(\mathsf{T}^d)$ par la même formule que dans le cas euclidien :

$$\mathrm{Op}_\hbar(a) f(x) = \int_{\mathsf{R}^d} k_\hbar(x,y) f(y) dy, \tag{6.3}$$

où, là aussi, on a utilisé l'identification des fonctions sur le tore T^d aux fonctions de R^d qui sont 2π-périodiques. Remarquons que pour tout $x \in \mathsf{R}^d$, la fonction $y \mapsto k_\hbar(x,y)$ est une fonction continue à décroissance rapide en y ; par conséquent, la formule (6.3) définit bien un réel pour toute fonction f localement intégrable et bornée, ce qui est le cas en particulier si f est continue et 2π-périodique. La proposition suivante nous montre que l'opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ envoie une fonction sur le tore en une fonction sur le tore et permet ainsi de définir le calcul pseudo-différentiel sur le tore.

Proposition 6.1. *Soit $f \in C^0(\mathsf{T}^d)$ et $a \in C_0^\infty(\mathsf{T}^d \times \mathsf{R}^d)$, la fonction $x \mapsto \mathrm{Op}_\hbar(a) f(x)$ est une fonction $(2\pi\mathsf{Z})^d$-périodique que l'on peut donc identifier à une fonction sur le tore T^d.*

Démonstration. Soit $x \in \mathsf{R}^d$ et $n \in (2\pi\mathsf{Z})^d$, on a

$$\mathrm{Op}_\hbar(a) f(x+n) = \int_{\mathsf{R}^d} k_\hbar(x+n, y) f(y) dy.$$

Mais, comme la fonction $k_\hbar$ vérifie (6.2), le changement de variable $y \mapsto y+n$ donne

$$\begin{aligned}\mathrm{Op}_\hbar(a)f(x+n) &= \int_{\mathsf{R}^d} k_\hbar(x+n, y+n) f(y+n)dy \\ &= \int_{\mathsf{R}^d} k_\hbar(x,y) f(y+n)dy \\ &= \int_{\mathsf{R}^d} k_\hbar(x,y) f(y)dy = \mathrm{Op}_\hbar(a)f(x)\end{aligned}$$

puisque la fonction f est elle aussi $(2\pi\mathsf{Z})^d$-périodique.

Remarque 6.2. On peut aussi décrire l'action de $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ avec un noyau défini sur $\mathsf{T}^d \times \mathsf{T}^d$:

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

Démonstration. En effet, on va décomposer l'espace R^d en l'union disjointe d'hypercubes $(C_n)_{n\in\mathsf{Z}^d}$, où pour $n \in (2\pi\mathsf{Z})^d$, on pose

$$C_n = 2\pi n + \mathsf{T}^d.$$

On écrit alors

$$\begin{aligned}\mathrm{Op}_\hbar(a)f(x) &= \sum_{n\in 2\pi\mathsf{Z}^d} \int_{C_n} k_\hbar(x,y) f(y)dy \\ &= \sum_{n\in 2\pi\mathsf{Z}^d} \int_{\mathsf{T}^d} k_\hbar(x,y+n) f(y+n)dy \\ &= \int_{\mathsf{T}^d} \Big(\sum_{n\in 2\pi\mathsf{Z}^d} k_\hbar(x,y+n) \Big) f(y)dy,\end{aligned}$$

où l'on a fait le changement de variable $y \mapsto y+n$ et utilisé la périodicité de f.

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

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

Rappelons la formule de Plancherel et ses conséquences sur le produit scalaire

$$\|f\|^2_{L^2(\mathsf{T}^d)} = (2\pi)^d \sum_{k\in\mathsf{Z}^d} \|\widehat{f}(k)\|^2, \quad \langle f,g\rangle = (2\pi)^d \sum_{k\in\mathsf{Z}^d} \overline{\widehat{f}(k)}\widehat{g}(k).$$

Proposition 6.3. *Soit* $a\in C_0^\infty(\mathsf{T}^d\times\mathsf{R}^d)$ *et*

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

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

$$\mathrm{Op}_\hbar(a)f(x) = \sum_{k,j\in\mathsf{Z}^d} \widehat{a}_{k-j}\big(\tfrac12\hbar(k+j)\big)\widehat{f}(j)e^{ik\cdot x}. \tag{6.4}$$

Démonstration. On part de l'équation (6.3) dans laquelle on injecte la formule (6.1), ce qui donne

$$\mathrm{Op}_\hbar(a)f(x) = (2\pi)^{-d}\int_{\mathsf{R}^d\times\mathsf{R}^d} a\big(\tfrac12(x+y),\hbar\xi\big)\mathrm{e}^{i\xi\cdot(x-y)}f(y)dy\,d\xi,$$

où l'on a fait le changement de variable $\xi\mapsto\hbar\xi$. On fait ensuite apparaître les coefficients de Fourier dans l'expression de $\mathrm{Op}_\hbar(a)f(x)$, en utilisant les formules :

$$f(y) = \sum_{j\in\mathsf{Z}^d}\widehat{f}(j)\mathrm{e}^{ij\cdot y} \quad \text{et} \quad a(x,\xi) = \sum_{\ell\in\mathsf{Z}^d}\widehat{a}_\ell(\xi)\mathrm{e}^{i\ell\cdot x}.$$

On a donc

$$\mathrm{Op}_\hbar(a)f(x) = (2\pi)^{-d}\sum_{j,\ell\in\mathsf{Z}^d}\int_{\mathsf{R}^{2d}}\widehat{f}(j)\widehat{a}_\ell(\hbar\xi)\mathrm{e}^{i\xi\cdot(x-y)+ij\cdot y+i\ell\cdot(x+y)/2}dy\,d\xi.$$

Une intégration en y fait apparaître la masse de Dirac $\delta(\xi-j-\ell/2)$. On obtient

$$\mathrm{Op}_\hbar(a)f(x) = \sum_{j,\ell\in\mathsf{Z}^d}\widehat{f}(j)\widehat{a}_\ell\left(\hbar\,(j+\ell/2)\right)\mathrm{e}^{ix\cdot(j+\ell)}.$$

Le changement d'indice $k=j+\ell$ donne $j+\ell/2=(j+k)/2$ et permet d'écrire

$$\mathrm{Op}_\hbar(a)f(x) = \sum_{k,j\in\mathsf{Z}^d}\widehat{f}(j)\widehat{a}_{k-j}\big(\tfrac12\hbar(k+j)\big)\mathrm{e}^{ix\cdot k}.$$

La formule (6.4) est à rapprocher de celles obtenues en utilisant la formule d'inversion de Fourier pour exprimer les opérateurs de multiplication en position et en impulsion : soit $\varphi \in C_0^\infty(\mathsf{T}^d)$ et $\Phi \in C_0^\infty(\mathsf{R}^d)$, pour $f \in L^2(\mathsf{T}^d)$, on a

$$\varphi(x)f(x) = \sum_{j,k\in\mathsf{Z}^d} \widehat{\varphi}(k-j)\widehat{f}(j)\mathrm{e}^{ik\cdot x}.$$

On remarque que $\mathrm{Op}_\hbar(\varphi(x))$ est bien l'opérateur de multiplication par φ. Par ailleurs, on a

$$\Phi(\hbar D)f(x) = \sum_{k\in\mathsf{Z}^d} \Phi(\hbar k)\widehat{f}(k)\mathrm{e}^{ik\cdot x},$$

ce qui s'écrit aussi

$$\begin{aligned}\Phi(\hbar D)f(x) &= \sum_{j,k\in\mathsf{Z}^d} \Phi(\hbar k)\delta_{k-j}\widehat{f}(j)\mathrm{e}^{ik\cdot x}\\ &= \sum_{j,k\in\mathsf{Z}^d} \Phi(\hbar j)\delta_{k-j}\widehat{f}(j)\mathrm{e}^{ik\cdot x}\\ &= \sum_{j,k\in\mathsf{Z}^d} \Phi\big(\tfrac{1}{2}\hbar(k+j)\big)\delta_{k-j}\widehat{f}(j)\mathrm{e}^{ik\cdot x},\end{aligned}$$

de sorte que

$$\mathrm{Op}_\hbar(\Phi(\xi)) = \Phi(\hbar D).$$

La formule (6.4) fait jouer des rôles symétriques à j et k. Remarquons qu'il s'agit bien de la quantification de Weyl : si a est à valeurs réelles, l'opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ est auto-adjoint du fait que $(k+j)/2$ apparaît dans la variable ξ et non k ou j.

6.2. Caractère borné sur $L^2(\mathsf{T}^d)$. On peut utiliser la formule (6.4) pour démontrer que l'opérateur $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ est uniformément borné sur $L^2(\mathsf{T}^d)$. On se ramène grâce à la formule de Plancherel à un résultat sur l'espace $\ell^2(\mathsf{Z})$ des suites de C^Z de carré sommable et on utilise une version discrète du lemme de Schur (lemme 2.1).

Lemme 6.4. *Soit P un opérateur défini sur C^Z par*

$$\forall u = (u_n)_{n\in\mathsf{Z}}, \quad (Pu)_n = \sum_{\ell\in\mathsf{Z}} A_{n,\ell}u_\ell. \tag{6.5}$$

On suppose qu'il existe une constante $C > 0$ telle que la famille $(A_{n,\ell})_{(n,\ell)\in\mathsf{Z}^2}$ vérifie

$$\sum_{n\in\mathsf{Z}}\sup_{\ell\in\mathsf{Z}}|A_{n,\ell}| < C \quad \textit{et} \quad \sum_{\ell\in\mathsf{Z}}\sup_{n\in\mathsf{Z}}|A_{n,\ell}| < C.$$

Alors P est un opérateur borné sur $\ell^2(\mathsf{Z})$ et $\|P\|_{\mathcal{L}(\ell^2(\mathsf{Z}))} \leqslant C$.

Ce lemme se démontre de la même manière que le lemme de Schur sur $L^2(\mathsf{R}^d)$ et nous laissons sa preuve en exercice. On l'utilise en remarquant que la formule de Plancherel permet de ramener l'étude de $\mathrm{Op}_\hbar(a)$ sur $L^2(\mathsf{T}^d)$ à l'étude sur $\ell^2(\mathsf{Z})$ de l'opérateur P défini par (6.5) avec

$$A_{n,\ell} = \widehat{a}_{n-\ell}\Big(\hbar\frac{n+\ell}{2}\Big), \quad (n,\ell)\in\mathsf{Z}^2.$$

On peut alors appliquer le lemme de Schur et on obtient la proposition suivante.

Proposition 6.5. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathsf{T}^d\times\mathsf{R}^d)$, et C la constante strictement positive définie par*

$$C = \sum_{k\in\mathsf{Z}}\sup_{\xi\in\mathsf{R}^d}|\widehat{a}_k(\xi)|.$$

On a

$$\forall\hbar\in\mathsf{R}_+^*, \quad \|\mathrm{Op}_\hbar(a)\|_{\mathcal{L}(L^2(\mathsf{T}^d))} \leqslant C.$$

La famille d'opérateur $(\mathrm{Op}_\hbar(a))_{\hbar>0}$ est donc une famille uniformément bornée de $\mathcal{L}(L^2(\mathsf{T}^d))$.

6.3. Propriétés. Les opérateurs pseudo-différentiels sur le tore jouissent des mêmes propriétés que ceux que nous avons définis sur R^d : caractère borné sur $L^2(\mathsf{T}^d)$, calcul symbolique, rôle prédominant de la diagonale dans le noyau. En revanche, la formule donnant la norme Hilbert-Schmidt comme l'intégrale du module au carré du symbole est un peu différente du cas euclidien.

Proposition 6.6. *Soit $a \in C_0^\infty(\mathsf{T}^d\times\mathsf{R}^d)$, alors*

$$\|\mathrm{Op}_\hbar(a)\|_{\mathrm{HS}} \sim_{\hbar\to 0} (2\pi\hbar)^{-d/2}\|a\|_{L^2(\mathsf{R}^{2d})}. \tag{6.6}$$

Il faut comparer ce résultat à celui de la proposition 3.1 dans le cas euclidien. En effet, pour un opérateur pseudo-différentiel sur R^d, la relation (6.6) est une égalité alors que sur T^d, on a seulement un équivalent.

Démonstration. On utilise la base hilbertienne de T^d donnée par les fonctions $(e_k)_{k\in\mathsf{Z}^d}$,

$$e_k(x) = (2\pi)^{-d/2}\mathrm{e}^{ik\cdot x}, \quad k \in \mathsf{Z}^d.$$

La formule de Plancherel donne

$$\|\mathrm{Op}_\hbar(a)e_n\|^2_{L^2(\mathsf{T}^d)} = \sum_{n\in\mathsf{Z}^d} \left|\widehat{a}_{k-n}\left(\hbar k + n/2\right)\right|^2.$$

On en déduit

$$\|\mathrm{Op}_\hbar(a)\|^2_{\mathrm{HS}} = \sum_{n,p\in\mathsf{Z}^d} \left|\widehat{a}_p\left(\hbar\left(n + p/2\right)\right)\right|^2.$$

Par définition des sommes de Riemann,

$$\sum_{n,p\in\mathsf{Z}^d} \left|\widehat{a}_p\left(\hbar\left(n + p/2\right)\right)\right|^2 \sim_{\hbar\to 0} \hbar^{-d} \sum_{p\in\mathsf{Z}^d} \int_{\mathsf{R}^d} |\widehat{a}_p(\xi)|^2 d\xi.$$

On a donc

$$\|\mathrm{Op}_\hbar(a)\|^2_{\mathrm{HS}} \sim_{\hbar\to 0} (2\pi\hbar)^{-d} \int_{\mathsf{T}^d\times\mathsf{R}^d} |a(x,\xi)|^2 dx\, d\xi,$$

où l'on a utilisé encore une fois la formule de Plancherel,

$$\forall \xi \in \mathsf{R}^d, \quad (2\pi)^d \sum_{p\in\mathsf{Z}} \widehat{a}_p(\xi) = \int_{\mathsf{T}^d} |a(x,\xi)|^2 dx.$$

Références

[AG91] S. Alinhac & P. Gérard – *Opérateurs pseudo-différentiels et théorème de Nash-Moser*, Savoirs Actuels, InterEditions, Paris ; Éditions du Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), 1991.

[Ana14] N. Anantharaman – « Le théorème d'ergodicité quantique », in *Chaos en mécanique quantique*, Journées X-UPS, Les Éditions de l'École polytechnique, Palaiseau, 2014, ce volume.

[AM14] N. Anantharaman & F. Macià – « Semiclassical measures for the Schrödinger equation on the torus », *J. Eur. Math. Soc. (JEMS)* **16** (2014), no. 6, p. 1253–1288.

[BFKG12] H. Bahouri, C. Fermanian-Kammerer & I. Gallagher – *Phase-space analysis and pseudodifferential calculus on the Heisenberg group*, Astérisque, vol. 342, Société Mathématique de France, Paris, 2012.

[BO27] M. Born & R. Oppenheimer – « Zur Quantentheorie der Molekeln », *Ann. der Phys. (4)* **84** (1927), p. 457–484.

[CV71] A.-P. Calderón & R. Vaillancourt – « On the boundedness of pseudo-differential operators », *J. Math. Soc. Japan* **23** (1971), p. 374–378.

[Dav95] E. B. Davies – *Spectral theory and differential operators*, Cambridge Studies in Advanced Math., vol. 42, Cambridge University Press, Cambridge, 1995.

[DS99] M. Dimassi & J. Sjöstrand – *Spectral asymptotics in the semi-classical limit*, London Math. Soc. Lect. Note Series, vol. 268, Cambridge University Press, Cambridge, 1999.

[Fau14] F. Faure – « Introduction au chaos classique et au chaos quantique », in *Chaos en mécanique quantique*, Journées X-UPS, Les Éditions de l'École polytechnique, Palaiseau, 2014, ce volume.

[FL12] C. Fermanian Kammerer & C. Lasser – « Single switch surface hopping for molecular quantum dynamics », *J. Math. Chem.* **50** (2012), no. 3, p. 620–635.

[FR14] V. Fischer & M. Ruzhansky – « A pseudo-differential calculus on graded nilpotent Lie groups », in *Fourier analysis*, Trends Math., Birkhäuser/Springer, Cham, 2014, p. 107–132.

[GL14] W. Gaim & C. Lasser – « Corrections to Wigner type phase space methods », *Nonlinearity* **27** (2014), no. 12, p. 2951–2974.

[GL93] P. Gérard & É. Leichtnam – « Ergodic properties of eigenfunctions for the Dirichlet problem », *Duke Math. J.* **71** (1993), no. 2, p. 559–607.

[GMMP97] P. Gérard, P. A. Markowich, N. J. Mauser & F. Poupaud – « Homogenization limits and Wigner transforms », *Comm. Pure Appl. Math.* **50** (1997), no. 4, p. 323–379.

[Hel03] B. Helffer – « 30 ans d'analyse semi-classique, bibliographie commentée », http://www.math.u-psud.fr/~helffer/histoire2003.ps, 2003.

[HS89] B. Helffer & J. Sjöstrand – « Équation de Schrödinger avec champ magnétique et équation de Harper », in *Schrödinger operators (Sønderborg, 1988)*, Lect. Notes in Physics, vol. 345, Springer, Berlin, 1989, p. 118–197.

[Hör79] L. Hörmander – « The Weyl calculus of pseudodifferential operators », *Comm. Pure Appl. Math.* **32** (1979), no. 3, p. 360–444.

[Hwa87] I. L. Hwang – « The L^2-boundedness of pseudodifferential operators », *Trans. Amer. Math. Soc.* **302** (1987), no. 1, p. 55–76.

[LR10] C. Lasser & S. Röblitz – « Computing expectation values for molecular quantum dynamics », *SIAM J. Sci. Comput.* **32** (2010), no. 3, p. 1465–1483.

[Ler10] N. Lerner – *Metrics on the phase space and non-selfadjoint pseudo-differential operators*, Pseudo-Differential Operators. Theory and Applications, vol. 3, Birkhäuser Verlag, Basel, 2010.

[LP93] P.-L. Lions & T. Paul – « Sur les mesures de Wigner », *Rev. Mat. Iberoamericana* **9** (1993), no. 3, p. 553–618.

[RT07] M. Ruzhansky & V. Turunen – « On the Fourier analysis of operators on the torus », in *Modern trends in pseudo-differential operators*, Oper. Theory Adv. Appl., vol. 172, Birkhäuser, Basel, 2007, p. 87–105.

[Shu87] M. A. Shubin – *Pseudodifferential operators and spectral theory*, Springer Series in Soviet Math., Springer-Verlag, Berlin, 1987, en russe : 1978.

[Vor77] A. Voros – « Développements semi-classiques », thèse d'état, 1977.

[Wey27] H. Weyl – « Quantenmechanik und Gruppentheorie », *Zeitschrift für Physik* **46** (1927), p. 1–46.

[Wig32] E. P. Wigner – « On the quantum correction for thermodynamic equilibrium », *Phys. Rev., II. Ser.* **40** (1932), p. 749–759.

[Wig59] ———, *Group theory and its application to the quantum mechanics of atomic spectra*, Pure and Applied Physics, vol. 5, Academic Press, New York-London, 1959.

[Zwo12] M. Zworski – *Semiclassical analysis*, Graduate Studies in Math., vol. 138, American Mathematical Society, Providence, RI, 2012.

Clotilde Fermanian Kammerer, Université Paris Est - Créteil Val-de-Marne, UFR des Sciences et Technologie, 61 avenue du Général de Gaulle, 94010 Créteil Cedex
E-mail : clotilde.fermanian@u-pec.fr