UNIVERSITÉ DE GENÈVE
Section de Physique

FACULTÉ DES SCIENCES
Professeur J.-P. Eckmann

Systèmes Mécaniques Couplés à des Bains Thermiques de Températures Différentes

Travail de diplôme
présenté à la Faculté des Sciences
de l'Université de Genève

par

Martin Hairer

Genève, novembre 1998

Table des matières

1 Introduction

Dans ce travail, nous allons nous intéresser à des systèmes mécaniques classiques couplés à plusieurs bains thermiques de températures différentes. Les bains thermiques seront modélisés par des théories de champ classiques dont l'évolution libre est gouvernée par l'équation d'onde. Ce travail s'inspire largement du travail de thèse de Luc Rey-Bellet [EPR, R-B] dont nous allons souvent reprendre les notations.

Dans une première partie, nous nous intéresserons au cas simple d'un unique rotateur couplé à deux bains de chaleur. Nous verrons que dans ce cas, la plupart des calculs peuvent être faits explicitement. En particulier, il est possible de donner la forme de la mesure invariante du système. Les résultats de cette partie seront ensuite généralisés au cas d'un système intégrable quelconque couplé à plusieurs bains thermiques via ses différentes intégrales premières.

Nous nous intéresserons ensuite au cas où le couplage aux bains thermiques ne se fait plus par des constantes du mouvement, mais où celui-ci reste néanmoins confiné à une sous-variété compacte de l'espace des phases (p, q). Le résultat principal de cette partie sera la démonstration de l'existence d'une mesure invariante lisse pour le système.

Dans l'appendice, nous nous intéresserons à des hypothèses faibles sur le potentiel d'un opérateur de Schrödinger pour que celui-ci soit à résolvante compacte. Ceci n'a à première vue rien à voir avec le reste du travail. La motivation était de trouver un potentiel qui ne croisse pas uniformément à l'infini mais dont les dérivées secondes seraient toutefois bornées afin d'affaiblir les hypothèses de travail de [EPR, R-B].

Remerciements

Je voudrais tout d'abord remercier Luc Rey-Bellet pour le temps qu'il a consacré à m'expliquer son travail, ainsi que pour sa patience et sa disponibilité. Merci également au Prof. J.-P. Eckmann pour m'avoir proposé ce travail de diplôme, ainsi que pour ses suggestions. Merci enfin à mon père pour ses précieux conseils concernant la présentation de ce travail, à Marius Mantoiu et à Jaques Rougemont pour leurs conseils, ainsi qu'à Cynthia pour m'avoir écouté patiemment parler d'un sujet qui ne fait pas partie de ses centres d'intérêts majeurs...

2 Présentation du modèle

Le modèle sur lequel nous allons nous pencher dans un premier temps consiste en un rotateur couplé à deux bains thermiques de températures différentes.

Le rotateur est décrit par la variable complexe ψ qui peut, en termes de position et de quantité de mouvement être interprétée comme

$$\psi = \frac{p + iq}{\sqrt{2}} .$$

Le rotateur libre est décrit par un Hamiltonien du type

$$H_R(\psi) = |\psi|^2 + F(|\psi|^2) ,$$

où $F : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ est une fonction $\mathcal{C}^1$ bornée inférieurement telle que $F'(0) = 0$. On pourrait par exemple prendre $F(x) = x^2 + \cos(x)$.

En termes de p et q, nous avons donc

$$H_R(p,q) = \frac{p^2 + q^2}{2} + F\Big(\frac{p^2 + q^2}{2}\Big) .$$

Les équations du mouvement dans cette représentation sont données par

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial H}{\partial p} &&= p + pF'(\tfrac{p^2+q^2}{2}) , \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial q} &&= -q - qF'(\tfrac{p^2+q^2}{2}) . \end{aligned} \tag{2.1}$$

Afin de mieux voir certaines propriétés du système, il est utile d'utiliser les coordonnées J et θ définies par

$$\psi = \sqrt{2J}e^{i\theta} .$$

L'espace des phases du rotateur libre est alors donné par $\mathbb{R}_+ \times S^1$. On peut encore voir que le changement de variables $(p,q) \mapsto (J,\theta)$ est canonique. En effet, on a

$$\left|\frac{\partial(p,q)}{\partial(J,\theta)}\right| = \begin{vmatrix} \frac{1}{\sqrt{2J}}\cos\theta & -\sqrt{2J}\sin\theta \\ \frac{1}{\sqrt{2J}}\sin\theta & \sqrt{2J}\cos\theta \end{vmatrix} = 1 .$$

L'Hamiltonien libre du bain thermique est alors donné simplement par

$$H_B(J,\theta) = J + F(J) .$$

Les équations du mouvement dans cette représentation sont donc

$$\begin{aligned} \dot{\theta} &= \frac{\partial H}{\partial J} &&= 1 + F'(J) , \\ \dot{J} &= -\frac{\partial H}{\partial \theta} &&= 0 . \end{aligned} \tag{2.2}$$

Le modèle utilisé pour décrire un bain thermique est la théorie des champs classiques associée à l'équation d'ondes unidimensionelle. Nous allons dans un premier temps noter le champ ζ et son moment conjugué π. Nous allons noter φ le vecteur donné par

$$\varphi = \binom{\zeta}{\pi} .$$

Ce vecteur vit dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H} = H^1(\mathbb{R}) \oplus L^2(\mathbb{R})$ qui est la complétion de $\mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R}) \oplus \mathcal{C}_0^\infty(\mathbb{R})$ par rapport au produit scalaire donné par

$$\langle \varphi_1, \varphi_2 \rangle_{\mathcal{H}} = \int_{\mathbb{R}} (\partial_x \bar{\zeta}_1(x)\, \partial_x \zeta_2(x) + \bar{\pi}_1(x)\, \pi_2(x))\, dx ,$$

où nous avons noté ∂_x l'opérateur dérivée selon la variable x. L'Hamiltonien libre du bain thermique est alors donné par

$$H_B(\varphi) = \frac{1}{2} \|\varphi\|_{\mathcal{H}}^2 ,$$

où $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$ est la norme dérivant du produit scalaire $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$. Les équations de mouvement dérivant de cet Hamiltonien sont

$$\dot{\varphi} = \mathcal{L}\varphi \qquad \text{avec} \qquad \mathcal{L} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \partial_x^2 & 0 \end{pmatrix} .$$

L'adjoint dans $\mathcal{H}$ de l'opérateur $\mathcal{L}$ est $-\mathcal{L}$. En effet, on a

$$\langle \mathcal{L}\varphi_1, \varphi_2 \rangle_{\mathcal{H}} = \int_{\mathbb{R}} \left(\partial_x \bar{\pi}_1\, \partial_x \zeta_2 + \partial_x^2 \bar{\zeta}_1\, \pi_2 \right) dx = - \int_{\mathbb{R}} \left(\bar{\pi}_1\, \partial_x^2 \zeta_2 + \partial_x \bar{\zeta}_1\, \partial_x \pi_2 \right) dx = -\langle \varphi_1, \mathcal{L}\varphi_2 \rangle_{\mathcal{H}}.$$

Passons maintenant au couplage entre le rotateur et les deux bains thermiques. Nous appellerons les deux bains φ_0 et φ_1. Dans la représentation (p, q), l'espace des phases du système complet sera donné par $\mathbb{R}^2 \times \mathcal{H} \times \mathcal{H}$ et nous choisissons de prendre comme Hamiltonien

$$H(p, q, \varphi_0, \varphi_1) = H_R(p, q) + H_B(\varphi_0) + H_B(\varphi_1) + \frac{p^2 + q^2}{2} \int_{\mathbb{R}} (\varrho_0(x) \partial_x \zeta_0(x) + \varrho_1(x) \partial_x \zeta_1(x)) dx.$$

Dans cette équation, les fonctions ϱ_0 et ϱ_1 appartiennent à $L^1(\mathbb{R})$ et permettent de décrire la manière dont le rotateur est couplé au bain thermique. Nous introduisons les fonctions $\alpha_i \in \mathcal{H}$ avec $i \in \{0, 1\}$ définies par

$$\alpha_i(x) = \begin{pmatrix} \int_0^x \varrho_i(y)\, dy \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Nous supposerons que les ϱ_i choisis ont un comportement suffisamment régulier pour que l'on ait $\alpha_i \in \mathcal{H}$. Ceci nous permet d'écrire l'Hamiltonien du système entier comme

$$H(p, q, \varphi_0, \varphi_1) = H_R(p, q) + H_B(\varphi_0) + H_B(\varphi_1) + \frac{p^2 + q^2}{2} (\langle \alpha_0, \varphi_0 \rangle_{\mathcal{H}} + \langle \alpha_1, \varphi_1 \rangle_{\mathcal{H}}) .$$

Les équations du mouvement sont alors données par

$$\begin{aligned} \dot{q} &= p + pF'(\tfrac{p^2+q^2}{2}) + p(\langle \alpha_0, \varphi_0 \rangle_{\mathcal{H}} + \langle \alpha_1, \varphi_1 \rangle_{\mathcal{H}}) , \\ \dot{p} &= -q - qF'(\tfrac{p^2+q^2}{2}) - q(\langle \alpha_0, \varphi_0 \rangle_{\mathcal{H}} + \langle \alpha_1, \varphi_1 \rangle_{\mathcal{H}})) , \\ \dot{\varphi}_i &= \mathcal{L}(\varphi_i + \alpha_i\, (p^2 + q^2)/2) , \end{aligned} \tag{2.3}$$

où $i \in \{0,1\}$. La dernière équation est une équation différentielle linéaire inhomogène qui peut être résolue formellement pour donner

$$\varphi_i(t) = e^{\mathcal{L}t}\varphi_i(0) + \int_0^t (\mathcal{L}e^{\mathcal{L}(t-s)}\alpha_i)\frac{p^2(s)+q^2(s)}{2}ds \; . \tag{2.4}$$

Afin d'alléger l'écriture par la suite, nous introduisons les fonctions de dissipation D_i définies par

$$D_i(t-s) = \langle \alpha_i, \mathcal{L}e^{\mathcal{L}(t-s)}\alpha_i\rangle_{\mathcal{H}} \; .$$

Nous allons maintenant faire un petit abus de notation et noter ϱ_i le vecteur $\left(\begin{smallmatrix}\varrho_i \\ 0\end{smallmatrix}\right)$. En utilisant le fait que $\partial_x\alpha_i = \varrho_i$ et en observant que ∂_x commute avec $\mathcal{L}$, on a

$$D_i(t-s) = \int_{\mathbb{R}} \bar{\varrho}_i(x)\mathcal{L}e^{\mathcal{L}(t-s)}\varrho_i(x)\,dx \; .$$

On utilise maintenant le fait que, dans l'espace de Fourier, l'opérateur ∂_x devient l'opérateur multiplication par ik. On a ainsi

$$\mathcal{L} \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -k^2 & 0 \end{pmatrix} \qquad \Rightarrow \qquad \mathcal{L}e^{\mathcal{L}t} \equiv \begin{pmatrix} -k\sin(kt) & \cos(kt) \\ -k^2\cos(kt) & -k\sin(kt) \end{pmatrix} \; .$$

Ceci nous permet d'écrire pour D_i :

$$D_i(t-s) = -\int_{\mathbb{R}} |\hat{\varrho}_i(k)|^2 k\sin(k(t-s))\,dk \; ,$$

où $\hat{\varrho}_i$ dénote la transformée de Fourier de ϱ_i. A l'aide de ces fonctions de dissipation et des expressions (2.3) et (2.4), nous pouvons écrire

$$\begin{aligned}
\dot{q}(t) &= p(t) + p(t)F'\Big(\frac{p^2(t)+q^2(t)}{2}\Big) \\
&\quad + p(t)\sum_{i=0}^{1}\Big(\langle\varphi_i(0), e^{-\mathcal{L}t}\alpha_i\rangle_{\mathcal{H}} + \int_0^t D_i(t-s)\frac{p^2(s)+q^2(s)}{2}\,ds\Big) \; , \\
\dot{p}(t) &= -q(t) - q(t)F'\Big(\frac{p^2(t)+q^2(t)}{2}\Big) \\
&\quad - q(t)\sum_{i=0}^{1}\Big(\langle\varphi_i(0), e^{-\mathcal{L}t}\alpha_i\rangle_{\mathcal{H}} + \int_0^t D_i(t-s)\frac{p^2(s)+q^2(s)}{2}\,ds\Big) \; .
\end{aligned} \tag{2.5}$$

2.1 Conditions initiales des bains

Nous allons maintenant nous occuper des conditions initiales des deux bains. Nous allons supposer qu'ils se trouvent à l'équilibre thermique avec les températures inverses respectives β_0 et β_1. Etre à l'équilibre thermique signifie que les conditions initiales sont distribuées selon la mesure de Gibbs $\exp(-\beta H)$. On sait que l'Hamiltonien d'un bain est donné par $\langle\varphi,\varphi\rangle_{\mathcal{H}}/2$. Ceci implique que la distribution des conditions initiales du bain à la température $1/\beta$ est Gaussienne de moyenne nulle et de covariance $\langle\!\langle \langle\varphi, f\rangle_{\mathcal{H}}\langle\varphi, g\rangle_{\mathcal{H}}\rangle\!\rangle = \langle f, g\rangle_{\mathcal{H}}/\beta$. Dans cette dernière expression, $\langle\!\langle\cdot\rangle\!\rangle$ signifie que l'on prend la moyenne sur toutes les configurations de φ possibles. Dans le cas de deux bains, ceci donne

$$\langle\!\langle \langle\varphi_i, f\rangle_{\mathcal{H}} \langle\varphi_j, g\rangle_{\mathcal{H}} \rangle\!\rangle = \delta_{ij}\langle f, g\rangle_{\mathcal{H}}/\beta_i \ .$$

Nous définissons maintenant des fonctions $\xi_i(t)$ par $\xi_i(t) = \langle\varphi_i(0), e^{-\mathcal{L}t}\alpha_i\rangle_{\mathcal{H}}$. Les ξ_i sont donc, par ce que nous venons de dire, des processus aléatoires de moyenne nulle et de covariance

$$\begin{aligned} \langle\!\langle \xi_i(t)\xi_j(s)\rangle\!\rangle &= \langle\!\langle \langle\varphi_i(0), e^{-\mathcal{L}t}\alpha_i\rangle_{\mathcal{H}} \langle\varphi_j(0), e^{-\mathcal{L}s}\alpha_j\rangle_{\mathcal{H}} \rangle\!\rangle \\ &= \delta_{ij}\langle e^{-\mathcal{L}t}\alpha_i, e^{-\mathcal{L}s}\alpha_j\rangle_{\mathcal{H}}/\beta_i = \delta_{ij}C_i(t-s)/\beta_i \ . \end{aligned} \tag{2.6}$$

Dans cette expression, nous avons introduit les fonctions de covariance C_i définies par

$$C_i(t-s) = \langle\alpha_i, e^{\mathcal{L}(t-s)}\alpha_j\rangle_{\mathcal{H}} = \int_{\mathbb{R}} |\hat\varrho_i(k)|^2 \cos(k(t-s))\, dk \ .$$

Il suffit d'un calcul élémentaire pour voir que l'on a la relation

$$\dot C_i(t) = D_i(t) \ ,$$

connue sous le nom de théorème de fluctuation-dissipation. Nous allons maintenant introduire des variables auxiliaires qui nous permettront de transformer le système d'équations intégro-différentielles aléatoires (2.5) en un système d'équations différentielles stochastiques Markoviennes.

Pour ceci, nous allons supposer que l'on peut écrire

$$C_i(t-s) = \sum_{m=1}^{M} \lambda_{i,m}^2 e^{-\gamma_{i,m}|t-s|} = \sum_{m=1}^{M} C_{i,m}(t-s) \ .$$

Ceci est le cas si nous choisissons pour les transformées de Fourier des densités ϱ_i des fonctions de la forme

$$\hat\varrho_i(k) = \prod_{m=1}^{M} \frac{\text{const}}{\sqrt{k^2+\gamma_{i,m}^2}} \ .$$

Nous pouvons alors récrire les processus stochastiques $\xi_i(t)$ sous la forme

$$\xi_i(t) = \sum_{m=1}^{M} \lambda_{i,m}\sqrt{\frac{2\gamma_{i,m}}{\beta_i}} \int_{-\infty}^{t} e^{-\gamma_{i,m}(t-s)}\, dw_{i,m}(s) = \sum_{m=1}^{M} \xi_{i,m}(t) \ , \tag{2.7}$$

où $w_{i,m}(s)$ dénote un processus de Wiener unidimensionnel de covariance

$$\langle\!\langle (w_{i,m}(t) - w_{i,m}(s))(w_{j,n}(t') - w_{j,n}(s'))\rangle\!\rangle = \delta_{ij}\delta_{mn}|[s,t]\cap[s',t']| \ .$$

Dans cette expression, la moyenne est prise sur l'espace de probabilité du processus de Wiener. Cette dernière expression peut formellement s'écrire

$$\langle\!\langle dw_{i,m}(s)\, dw_{j,n}(t)\rangle\!\rangle = \delta_{ij}\delta_{mn}\delta(s-t)\, ds\, dt \ . \tag{2.8}$$

Pour une explication plus détaillée et plus rigoureuse, voir [Ne]. L'intégrale apparaissant dans (2.7) doit être interprétée comme une intégrale stochastique d'Itô. En utilisant les expressions (2.7) et (2.8), on retrouve pour $\langle\!\langle \xi_i(t)\xi_j(s)\rangle\!\rangle$ la même covariance que dans (2.6). Comme un processus Gaussien est uniquement déterminé par sa moyenne et sa matrice de covariance, nous avons justifié l'écriture (2.7).

2.2 Variables effectives des bains

Nous définissons maintenant les variables auxiliaires $r_{i,m} \in \mathbb{R}$ par

$$r_{i,m}(t) = \lambda_{i,m}^2 \int_0^t C_{i,m}(t-s)\frac{p^2(s)+q^2(s)}{2}\,ds - \xi_{i,m}(t)\ .$$

On a donc $\langle \alpha_i, \varphi_i \rangle_{\mathcal{H}} = \sum_m r_{i,m}$. Ces variables auxiliaires nous permettent de récrire le système (2.5) sous la forme

$$\begin{aligned} dq(t) &= p(t)\,dt + p(t)F'\Big(\frac{p^2(t)+q^2(t)}{2}\Big)\,dt + p(t)\sum_{i=0}^{1}\sum_{m=1}^{M} r_{i,m}\,dt\ , \\ dp(t) &= -q(t)\,dt - q(t)F'\Big(\frac{p^2(t)+q^2(t)}{2}\Big)\,dt - q(t)\sum_{i=0}^{1}\sum_{m=1}^{M} r_{i,m}\,dt\ , \\ dr_{i,m}(t) &= -\gamma_{i,m}r_{i,m}(t)\,dt + \lambda_{i,m}^2\gamma_{i,m}\frac{p^2(t)+q^2(t)}{2}\,dt - \lambda_{i,m}\sqrt{\frac{2\gamma_{i,m}}{\beta_i}}\,dw_{i,m}(t)\ . \end{aligned} \tag{2.9}$$

Ceci est un système d'équations différentielles stochastiques Markoviennes. L'espace des phases de notre système est maintenant donné par $\mathcal{X} = \mathbb{R}^{2+2M}$. Dans la partie suivante de ce travail, nous allons montrer que, si nous restreignons cet espace des phases, ce système d'équations admet une unique mesure invariante et que celle-ci est mélangeante.

3 Etude de la mesure invariante

3.1 Définitions préliminaires

Définition 3.1 *Soit $\mathcal{B}$ un espace de Banach. Un* semigroupe P^t *sur $\mathcal{B}$ est une famille d'opérateurs linéaires bornés $P^t : \mathcal{B} \to \mathcal{B}$, définis pour $0 \le t < \infty$ tels que $P^0 = 1$ et $P^s P^t = P^{s+t}$ pour tout $s,t \in [0,\infty)$. On dit que P^t est* fortement continu *si, pour tout $v \in \mathcal{B}$, l'application $t \mapsto P^t v$ est continue.*

Définition 3.2 *Un* semigroupe contractant P^t *sur $\mathcal{B}$ est un semigroupe fortement continu tel que l'on a $\|P^t v\| \le \|v\|$ pour tout v dans $\mathcal{B}$ et pour tout $t \ge 0$.*

Définition 3.3 *Soit P^t un semigroupe sur un espace de Banach $\mathcal{B}$. Le* générateur infinitésimal *A de P^t est défini par*

$$Av = \lim_{t\to 0^+} \frac{P^t v - v}{t}$$

sur le domaine $\mathcal{D}(A)$ de tous les vecteurs $v \in \mathcal{B}$ pour lesquels cette limite existe.

Nous allons maintenant considérer une équation stochastique Markovienne générique de la forme

$$dx(t) = b(x(t))\,dt + \sigma\,dw(t)\ . \tag{3.1}$$

Dans cette expression, $x \in \mathbb{R}^n$, b est un champ de vecteurs $\mathcal{C}^\infty$ et σ est une application linéaire de $\mathbb{R}^m$ dans $\mathbb{R}^n$ (m et n sont deux entiers quelconques). En fait, l'équation (3.1) est un abus de notation pour l'équation intégrale

$$\xi(t; x_0, w) = x_0 + \int_0^t b(\xi(s; x_0, w))\, ds + \sigma(w(t) - w(0)) \ . \tag{3.2}$$

Un argument de contraction permet alors de prouver l'existence d'une solution unique sur $\mathbb{R}$ à l'équation (3.2) lorsque la dérivée de b est bornée.

Dans ce cas, le semigroupe T^t engendré par l'équation (3.1) est défini par

$$T^t f(x_0) = \langle\!\langle f(\xi(t; x_0, w)) \rangle\!\rangle \ ,$$

où $\langle\!\langle \cdot \rangle\!\rangle$ dénote la valeur d'espérance dans l'espace de probabilité associé au processus de Wiener w. Le générateur infinitésimal de ce semigroupe est alors donné par

$$L = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \partial_{x_i} (\sigma \sigma^T)_{i,j} \partial_{x_j} + \sum_i b_i(x) \partial_{x_i} \ .$$

3.2 Existence d'une solution et générateur du semi-groupe

La première chose à vérifier est l'existence d'une solution du système d'équations (2.9) pour chaque fonction continue w. L'équation (2.9) est déjà sous la forme générique (3.1). Néanmoins, il semble à première vue que les dérivées de b ne soient pas bornées. Ceci n'est pas un problème. En effet, il suffit de se mettre dans la représentation en terme de variables J et θ pour que (2.9) devienne

$$\begin{aligned} dJ(t) &= 0 \ , \\ d\theta(t) &= dt + F'(J)\, dt + \sum_{i=0}^{1} \sum_{m=1}^{M} r_{i,m}\, dt \ , \\ dr_{i,m}(t) &= -\gamma_{i,m} r_{i,m}(t)\, dt + \lambda_{i,m}^2 \gamma_{i,m} J\, dt - \lambda_{i,m} \sqrt{\frac{2\gamma_{i,m}}{\beta_i}}\, dw_{i,m}(t) \ . \end{aligned} \tag{3.3}$$

La variable J est donc une constante du mouvement. On peut ainsi la considérer comme une constante que l'on se fixe au début. On voit que la dérivée de b est alors bornée. La solution de (3.3) existe donc pour tout temps et est unique. Ceci implique immédiatement l'existence et l'unicité de la solution de (2.9) pour tout temps.

De plus, l'espace des phases se réduit alors à la sous-variété $J(t) = J_0$. Nous appellerons cette sous-variété $\tilde{\mathcal{X}}$. On a bien sûr $\tilde{\mathcal{X}} \approx S^1 \times \mathbb{R}^{2M}$.

Dans l'espace de Hilbert $L^2(\mathcal{X}, dx)$, le générateur du semi-groupe T^t associé à (2.9) est donné par

$$\begin{aligned} L &= \sum_{i,m} \frac{\lambda_{i,m}^2 \gamma_{i,m}}{\beta_i} \partial_{r_{i,m}}^2 + p\Big(1 + F'(J) + \sum_{i,m} r_{i,m}\Big)\partial_q - q\Big(1 + F'(J) + \sum_{i,m} r_{i,m}\Big)\partial_p \\ &- \sum_{i,m} \gamma_{i,m}(r_{i,m} - \lambda_{i,m}^2 J)\partial_{r_{i,m}} \ , \end{aligned} \tag{3.4}$$

où la somme sur i et m parcourt toutes les valeurs possibles. Nous avons utilisé le fait que $J = (p^2 + q^2)/2$ afin d'alléger les notations. L'adjoint formel de L est donné par

$$\begin{aligned} L^T &= \sum_{i,m} \frac{\lambda_{i,m}^2 \gamma_{i,m}}{\beta_i} \partial_{r_{i,m}}^2 - p\Big(1 + F'(J) + \sum_{i,m} r_{i,m}\Big)\partial_q + q\Big(1 + F'(J) + \sum_{i,m} r_{i,m}\Big)\partial_p \\ &+ \sum_{i,m} \gamma_{i,m}(r_{i,m} - \lambda_{i,m}^2 J)\partial_{r_{i,m}} + \sum_{i,m} \gamma_{i,m} \ . \end{aligned} \tag{3.5}$$

Une mesure invariante μ de densité $f(x)$ $(x \in \mathcal{X})$ est donnée par une solution de l'équation $L^T f = 0$. On ne peut pas espérer que cette équation ait une solution unique. En effet, l'opérateur L^T commute avec l'opérateur $p^2 + q^2$, ce qui est une conséquence directe du fait que $p^2 + q^2$ est une constante du mouvement.

Si, par contre, on se restreint à l'espace $\tilde{\mathcal{X}}$, le générateur $\tilde{L}$ de T^t est donné par

$$\begin{aligned} \tilde{L} &= \sum_{i,m} \frac{\lambda_{i,m}^2 \gamma_{i,m}}{\beta_i} \partial_{r_{i,m}}^2 + \Big(1 + F'(J) + \sum_{i,m} r_{i,m}\Big)\partial_\theta \\ &- \sum_{i,m} \gamma_{i,m}(r_{i,m} - \lambda_{i,m}^2 J)\partial_{r_{i,m}} \ . \end{aligned} \tag{3.6}$$

Son adjoint dans $L^2(\tilde{\mathcal{X}}, dx)$ est donné par

$$\begin{aligned} \tilde{L}^T &= \sum_{i,m} \frac{\lambda_{i,m}^2 \gamma_{i,m}}{\beta_i} \partial_{r_{i,m}}^2 - \Big(1 + F'(J) + \sum_{i,m} r_{i,m}\Big)\partial_\theta \\ &+ \sum_{i,m} \gamma_{i,m}(r_{i,m} - \lambda_{i,m}^2 J)\partial_{r_{i,m}} + \sum_{i,m} \gamma_{i,m} \ . \end{aligned} \tag{3.7}$$

Les opérateurs $\tilde{L}$ et $\tilde{L}^T$ peuvent tous deux être écrits sous la forme

$$\mathcal{O} = \sum_{j=1}^{J} Y_j^2 + Y_0 + c \ ,$$

où les Y_j avec $j \in \{0, \ldots, J\}$ sont des champs de vecteurs réels $\mathcal{C}^\infty$ et c est une fonction $\mathcal{C}^\infty$. Par le théorème de Hörmander [Hö1, Thm 1.1], une condition suffisante pour que l'opérateur $\mathcal{O}$ soit hypoelliptique est que l'algèbre de Lie engendrée par les Y_j soit de rang maximal en tout point. Dans notre cas, on voit que c'est bien le cas. En effet, prenons $\tilde{L}$. On écrit

$$\tilde{L} = \sum_{i,m} Y_{i,m}^2 + Y_0 \ ,$$

avec

$$Y_{i,m} = \lambda_{i,m} \sqrt{\frac{\gamma_{i,m}}{\beta_i}} \partial_{r_{i,m}} \qquad \text{et} \qquad Y_0 = (1 + F'(J) + \sum_{i,m} r_{i,m})\partial_\theta - \sum_{i,m} \gamma_{i,m}(r_{i,m} - \lambda_{i,m}^2 J)\partial_{r_{i,m}} \ .$$

On voit que l'on a

$$[Y_{i,m}, Y_0] = \lambda_{i,m} \sqrt{\frac{\gamma_{i,m}}{\beta_i}} (\partial_\theta - \gamma_{i,m}\partial_{r_{i,m}}) \ .$$

L'algèbre de Lie générée par Y_0 et les $Y_{i,m}$ engendre donc bien tout l'espace tangent de $\tilde{\mathcal{X}}$. Pour $\tilde{L}^T$, on peut faire exactement le même calcul. $\tilde{L}$ et $\tilde{L}^T$ sont donc tous deux hypoelliptiques, c'est-à-dire que si $\tilde{L}f = g$ avec $g \in \mathcal{C}^\infty(\tilde{\mathcal{X}})$, alors $f \in \mathcal{C}^\infty(\tilde{\mathcal{X}})$.

Remarque. Si nous avions gardé $\mathcal{X}$ comme espace des phases, nous aurions remarqué que L et L^T ne sont pas hypoelliptiques.

Nous cherchons maintenant à démontrer l'unicité et l'existence d'une fonction $f \in L^2(\tilde{\mathcal{X}}, dx)$ telle que $\tilde{L}^T f = 0$.

3.3 Existence et unicité de la mesure invariante

Une belle propriété du système que nous sommes en train de considérer est que sa mesure invariante peut être exhibée explicitement.

Définissons des Hamiltoniens "effectifs" pour les deux bains de chaleur par

$$G_i(J, \theta, r) = \sum_{m=1}^{M} \left(\frac{r_{i,m}^2}{2\lambda_{i,m}^2} - J r_{i,m} \right) .$$

On vérifie alors que la mesure

$$\mu(dx) = Z_0^{-1}\, e^{-\beta_1 G_1 - \beta_2 G_2}\, dx \,, \tag{3.8}$$

avec $dx = d\theta\, dr$ est une mesure invariante si la constante Z_0 est bien choisie. C'est bien une mesure de probabilité car $G_i \to \infty$ de façon polynômiale lorsque $r_{i,m} \to \infty$. De plus, μ est la seule mesure invariante. En effet, du fait de l'hypoellipticité de $\tilde{L}^T$, une autre mesure invariante serait également de densité lisse. Mais on sait que deux mesures invariantes à densités lisses sont de supports disjoints. Comme le support de μ est $\tilde{\mathcal{X}}$ tout entier, il ne peut y avoir d'autre mesure invariante.

3.4 Propriété mélangeante de la mesure invariante

Dans ce paragraphe, nous allons montrer que la mesure invariante μ donnée par (3.8) est mélangeante, c'est-à-dire que

$$\lim_{t\to\infty} \int f(x) T^t g(x) \mu(dx) = \int f(x)\mu(dx) \int g(x)\mu(dx)$$

pour toutes les fonctions $f, g \in L^2(\tilde{\mathcal{X}}, \mu(dx))$. Nous allons pour ceci suivre la démonstration de la Proposition 3.9 dans [EPR, R-B]. Nous allons dans ce paragraphe écrire $\mathcal{H}$ pour $L^2(\tilde{\mathcal{X}}, \mu(dx))$. Le produit scalaire et la norme associés seront appelés $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$ et $\| \cdot \|_{\mathcal{H}}$ respectivement. Nous définissons de plus $h(x)$ par $\mu(dx) = h(x)\, dx$.

Le fait que μ soit mélangeante est alors équivalent à

$$\operatorname*{w-lim}_{t\to\infty} T^t_{\mathcal{H}} f = \langle 1, f \rangle_{\mathcal{H}} \qquad \text{pour tout} \qquad f \in \mathcal{H} \,,$$

où w-lim dénote la limite faible.

Nous allons également noter $T^t_{\mathcal{H}}$ l'extension à $\mathcal{H}$ de T^t vu comme semigroupe fortement continu sur $\mathcal{C}_\infty(\tilde{\mathcal{X}})$. On va aussi noter par $\mathcal{C}^2(\tilde{\mathcal{X}})$ l'espace des fonctions sur $\tilde{\mathcal{X}}$ telles que toutes les dérivées d'ordre inférieur ou égal à 2 existent et sont continues et bornées.

Pour une fonction $f \in \mathcal{C}^2(\tilde{\mathcal{X}})$, on obtient ainsi

$$\partial_t \|T^t_{\mathcal{H}} f\|^2_{\mathcal{H}} = \langle \tilde{L} T^t_{\mathcal{H}} f, T^t_{\mathcal{H}} f\rangle_{\mathcal{H}} + \langle T^t_{\mathcal{H}} f, \tilde{L} T^t_{\mathcal{H}} f\rangle_{\mathcal{H}} \ .$$

Afin d'évaluer cette expression, on utilise le fait que l'on a pour $f, g \in \mathcal{C}^2(\tilde{\mathcal{X}})$ l'égalité

$$\tilde{L}^T(fg) = f\tilde{L}^T g + g\tilde{L}^T f + \sum_{i,m}\Big(\frac{2\lambda^2_{i,m}\gamma_{i,m}}{\beta_i}(\partial_{r_{i,m}} f)(\partial_{r_{i,m}} g) - \gamma_{i,m} fg\Big) \ .$$

Cette égalité se vérifie par un simple calcul. On a de plus

$$\tilde{L} + \tilde{L}^T = \sum_{i,m}\Big(\frac{2\lambda^2_{i,m}\gamma_{i,m}}{\beta_i}\partial^2_{r_{i,m}} + \gamma_{i,m}\Big) \ . \tag{3.9}$$

Par la définition du produit scalaire et en utilisant le fait que $\tilde{L}^T h(x) = 0$, on trouve donc (on écrit g pour $T^t_{\mathcal{H}} f$ afin d'alléger la notation ; de plus, lorsque l'argument d'une fonction n'est pas écrit explicitement, elle est évaluée au point x)

$$\partial_t \|T^t_{\mathcal{H}} f\|^2_{\mathcal{H}} = \int \bar{g}(\tilde{L} g + \tilde{L}^T g) h \, dx + \sum_{i,m} \int \bar{g} \Big(\frac{2\lambda^2_{i,m}\gamma_{i,m}}{\beta_i}(\partial_{r_{i,m}} g)(\partial_{r_{i,m}} h) - \gamma_{i,m}\, gh\Big) \, dx \ .$$

En utilisant l'expression (3.9) et en intégrant une fois par parties selon $r_{i,m}$, on trouve pour finir

$$\partial_t \|T^t_{\mathcal{H}} f\|^2_{\mathcal{H}} = -\sum_{i,m} \frac{2\lambda^2_{i,m}\gamma_{i,m}}{\beta_i} \|\partial_{r_{i,m}} T^t_{\mathcal{H}} f\|^2_{\mathcal{H}} \ .$$

Donc, $\|T^t_{\mathcal{H}} f\|^2_{\mathcal{H}}$ est une fonction décroissante, continue et bornée inférieurement. En conséquence, $\lim_{t\to\infty} \|T^t_{\mathcal{H}} f\|^2_{\mathcal{H}}$ existe et

$$\|\partial_{r_{i,m}} T^t_{\mathcal{H}} f\|^2_{\mathcal{H}} \in L^1([0,\infty), dt) \ .$$

Nous définissons une $(\star)$-séquence $\{t_n\}$ comme étant une suite croissante et tendant vers l'infini telle que $\lim_{n\to\infty} \|\partial_{r_{i,m}} T^{t_n}_{\mathcal{H}} f\|^2_{\mathcal{H}} = 0$. On peut alors suivre pas à pas la démonstration de [EPR, R-B] pour montrer qu'il existe une $(\star)$-séquence $\{t_n\}$ telle que

$$\operatorname*{w-lim}_{n\to\infty} T^{t_n}_{\mathcal{H}} f \equiv \gamma$$

existe et que γ ne dépend pas de r. Il reste donc à montrer que γ ne dépend pas de θ. Pour ceci, prenons $\psi \in \mathcal{C}^\infty_0(\tilde{\mathcal{X}})$. On a alors

$$\begin{aligned}
\partial_t \langle \psi, T^t_{\mathcal{H}} f\rangle_{\mathcal{H}} &= \langle \psi, \tilde{L} T^t_{\mathcal{H}} f\rangle_{\mathcal{H}} \\
&= \sum_{i,m} \int \bar{\psi}(x) h(x) \, \frac{\lambda^2_{i,m}\gamma_{i,m}}{\beta_i} (\partial_{r_{i,m}} - \beta_i(r_{i,m}/\lambda^2_{i,m} - J))\partial_{r_{i,m}} T^t_{\mathcal{H}} f(x) \, dx \qquad (3.10) \\
&\quad + \int \bar{\psi}(x) h(x)(1 + F'(J) + \sum_{i,m} r_{i,m})\partial_\theta T^t_{\mathcal{H}} f(x) \, dx \ .
\end{aligned}$$

Jusqu'à la fin de ce paragraphe, une expression de la forme

$$\int \bar{\psi}(x)h(x)\partial_{r_{i,m}} T^t_{\mathcal{H}}\gamma(x)\, dx$$

doit être interprétée comme un abus de notation pour

$$-\int \partial_{r_{i,m}}(\bar{\psi}(x)h(x))T^t_{\mathcal{H}}\gamma(x)\, dx \; .$$

Comme on a pris $\psi \in \mathcal{C}_0^\infty(\tilde{\mathcal{X}})$, toutes ces expressions existent et sont bien définies. On a alors, en utilisant le fait que γ (et donc aussi $T^t_{\mathcal{H}}\gamma$) est indépendant de r,

$$\partial_t\langle\psi, T^t_{\mathcal{H}}\gamma\rangle_{\mathcal{H}} = \int \bar{\psi}(x)h(x)(1 + F'(J) + \sum_{i,m} r_{i,m})\partial_\theta T^t_{\mathcal{H}}\gamma(x)\, dx \; .$$

On choisit maintenant ψ de la forme $\psi(r,\theta) = \varphi_1(r)\varphi_2(\theta)/h(r,\theta)$ avec $\int \varphi_1(r)\, dr = 0$. On a donc

$$\langle\psi, T^t_{\mathcal{H}}\gamma\rangle_{\mathcal{H}} = \int (T^t_{\mathcal{H}}\gamma)(\theta)\, \bar{\varphi}_2(\theta)\, d\theta \int \bar{\varphi}_1(r)\, dr = 0 \qquad \forall t \geq 0 \; .$$

En dérivant cette expression par rapport à t et en posant ensuite $t = 0$, on trouve

$$\int \bar{\varphi}_1(r)\bar{\varphi}_2(\theta)(1 + F'(J) + \sum_{i,m} r_{i,m})\partial_\theta\gamma(\theta)\, dx = 0 \; ,$$

et donc

$$\int \bar{\varphi}_2(\theta)\partial_\theta\gamma(\theta)\, d\theta \int (1 + F'(J) + \sum_{i,m} r_{i,m})\bar{\varphi}_1(r)\, dr = 0 \; . \tag{3.11}$$

On peut alors choisir φ_1 de manière à ce que l'intégrale sur r soit non-nulle. Comme φ_2 est une fonction arbitraire de θ, il en suit que γ ne dépend pas de θ.

On conclut alors exactement de la même manière que [EPR, R-B].

4 Hamiltonien libre intégrable

Dans cette partie du travail, nous allons voir qu'il est aisé de généraliser les résultats que nous venons d'obtenir au cas où l'on a un Hamiltonien intégrable couplé à plusieurs bains de chaleur à travers ses variables d'action uniquement.

Définition 4.1 *Un système Hamiltonien à N degrés de liberté est dit* intégrable *s'il possède N intégrales premières $F_1, \ldots, F_N$ indépendantes et que la sous-variété $\mathcal{M}$ obtenue en fixant ces N intégrales premières est lisse et compacte.*

Il est alors possible de faire un changement de variables canoniques $(p,q) \mapsto (I,\theta)$ de façon à ce que l'Hamiltonien du système dépende de I uniquement (voir [A, Chap 10] pour plus de détails). De plus, la condition que $\mathcal{M}$ soit compacte implique que $\theta \in \mathcal{T}^N$ où $\mathcal{T}^N$ désigne le tore à N dimensions ($\mathcal{T}^N \approx (S^1)^N$).

Remarque. Il faut prendre la Définition 4.1 avec précaution. En effet, dans le cas du pendule simple, $H = p^2 + \sin^2 q$. Les trajectoires ne sont donc pas toutes fermées et il n'est par conséquent pas intégrable au sens de cette définition. Néanmoins, si les conditions initiales sont choisies de façon à ce qu'on se trouve sur une trajectoire fermée, nous verrons qu'avec la classe de couplages que nous considérons, on reste sur une telle trajectoire. On peut donc modifier l'Hamiltonien du système en-dehors d'un voisinage de la trajectoire, sans changer les équations du mouvement et le rendre ainsi intégrable au sens de la Définition 4.1. Dans l'exemple du pendule, on peut par exemple prendre $H_{\text{new}} = p^2 + f(q)$, où f est une fonction convexe $\mathcal{C}^\infty$ qui vérifie

$$f(q) = \begin{cases} \sin^2 q & q < \pi/2 \\ C\, q^2 & q > \pi \end{cases} .$$

Par analogie avec le début du travail, nous choisissons l'Hamiltonien total du système de la forme suivante :

$$H(I, \theta, \varphi) = H_L(I) + \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} \|\varphi_i\|_{\mathcal{H}}^2 + \sum_{i=1}^{n} \eta_i(I) \langle \alpha_i, \varphi_i \rangle_{\mathcal{H}} .$$

Dans cette expression, $H_L : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ est un Hamiltonien intégrable à N degrés de liberté et les $\eta_i : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ sont des fonctions continûment différentiables bornées inférieurement.

Introduisons encore quelques notations. Nous allons appeler les dérivées de l'Hamiltonien libre $\omega_j(I) = \partial H_L / \partial I_j$. De plus, nous introduisons la matrice de couplage $K(I)$ définie par

$$K(I) = (K_{ij}(I)) \qquad \text{avec} \qquad K_{ij}(I) = \partial_{I_j} \eta_i(I) .$$

$K(I)$ peut donc être vu comme une application linéaire de $\mathbb{R}^N$ dans $\mathbb{R}^n$.

On peut refaire le même calcul qu'avant pour montrer que les équations du mouvement peuvent s'écrire

$$\begin{aligned} dI_j(t) &= 0 , \\ d\theta_j(t) &= \omega_j(I)\, dt + \sum_{i=1}^{n} \partial_{I_j} \eta_i(I) \sum_{m=1}^{M} r_{i,m}\, dt , \\ dr_{i,m}(t) &= -\gamma_{i,m} r_{i,m}(t)\, dt + \lambda_{i,m}^2 \gamma_{i,m} \eta_i(I)\, dt - \lambda_{i,m} \sqrt{\frac{2\gamma_{i,m}}{\beta_i}}\, dw_{i,m}(t) . \end{aligned} \tag{4.1}$$

On a alors le théorème suivant.

Théorème 4.2 *Le processus de Markov (4.1) vu comme processus de Markov dans* $\tilde{\mathcal{X}} = \mathcal{T}^N \times \mathbb{R}^{nM}$ *possède une mesure invariante lisse donnée par*

$$\mu(dx) = Z^{-1} e^{-\sum_{i=1}^{n} \beta_i G_i}\, d\theta\, dr \qquad \textit{avec} \qquad G_i = \sum_m \left(\frac{r_{i,m}^2}{2\lambda_{i,m}^2} - \eta_i(I_0) r_{i,m} \right) ,$$

où I_0 *est la valeur des variables d'action donnée par les conditions initiales et* Z *est une constante permettant de normaliser la mesure à* $\mu(\tilde{\mathcal{X}}) = 1$*. Lorsque de plus* $K(I_0)$ *est de rang* N*, cette mesure est unique et mélangeante.*

Remarque. La condition $\operatorname{rang} K(I_0) = N$ signifie que toutes les variables d'angle doivent être couplées différemment aux bains thermiques. Si ce n'était pas le cas, l'évolution des variables d'angle serait corrélée. Afin d'avoir l'unicité et la propriété mélangeante de la mesure invariante dans le cas corrélé, il faudrait exprimer certaines des variables d'angle en fonction des autres et restreindre encore l'espace des phases. Si on veut que la condition $\operatorname{rang} K(I_0) = N$ soit satisfaite, il faut bien sûr que $n \geq N$. Cette condition est de plus indépendante de la manière d'écrire l'Hamiltonien de départ. En effet, si pour un i quelconque on fait la transformation $\eta_i \mapsto c\eta_i$ et $\alpha_i \mapsto c^{-1}\alpha_i$ avec $c > 0$, on ne change pas l'Hamiltonien. Cette transformation a pour effet de multiplier la $i$ème ligne de K par c, ce qui ne change pas le rang de K.

La condition $\theta \in \mathcal{T}^N$ est nécessaire pour que μ soit normalisable à $\int \mu(dx) = 1$.

Démonstration. La démonstration de l'existence d'une solution pour (4.1) à tout temps se fait de la même manière qu'avant. Comme auparavant, on restreint l'espace des phases à $\tilde{\mathcal{X}} = \mathcal{T}^N \times \mathbb{R}^{nM}$ en fixant les variables d'action. Le générateur $\tilde{L}$ du semigroupe associé au processus de Markov est alors donné par

$$\begin{aligned} \tilde{L} &= \sum_{i,m} \frac{\lambda_{i,m}^2 \gamma_{i,m}}{\beta_i} \partial_{r_{i,m}}^2 + \sum_{j=1}^{N} (\omega_j(I) + \sum_{i,m} \partial_{I_j} \eta_i(I)\, r_{i,m}) \partial_{\theta_j} \\ &- \sum_{i,m} \gamma_{i,m} (r_{i,m} - \lambda_{i,m}^2 \eta_i(I)) \partial_{r_{i,m}} \ . \end{aligned} \tag{4.2}$$

Son adjoint dans $L^2(\tilde{\mathcal{X}}, dx)$ est donné par

$$\begin{aligned} \tilde{L}^T &= \sum_{i,m} \frac{\lambda_{i,m}^2 \gamma_{i,m}}{\beta_i} \partial_{r_{i,m}}^2 - \sum_{j=1}^{N} (\omega_j(I) + \sum_{i,m} \partial_{I_j} \eta_i(I)\, r_{i,m}) \partial_{\theta_j} \\ &+ \sum_{i,m} \gamma_{i,m} (r_{i,m} - \lambda_{i,m}^2 \eta_i(I)) \partial_{r_{i,m}} + \sum_{i,m} \gamma_{i,m} \ . \end{aligned} \tag{4.3}$$

On vérifie par un simple calcul que la fonction $h(x) = \exp(-\sum_{i=1}^n \beta_i G_i)$ est solution de $\tilde{L}^T h = 0$. Pour montrer l'unicité de cette mesure invariante, il faut voir que $\tilde{L}^T$ est hypoelliptique.

Comme avant, on écrit $\tilde{L}^T = \sum_{i,m} Y_{i,m}^2 + Y_0 + c$ avec $Y_{i,m} \propto \partial_{r_{i,m}}$ et Y_0 la partie de $\tilde{L}^T$ qui est du premier ordre. On a alors

$$[Y_{i,m}, Y_0] \propto \sum_j \partial_{I_j} \eta_i(I) \partial_{\theta_j} + (\ldots) \partial_{r_{i,m}} \ .$$

Si on écrit ∂_θ pour le vecteur colonne $(\partial_{\theta_1}, \ldots, \partial_{\theta_N})^T$, on voit que les commutateurs du premier ordre permettent d'obtenir les champs vectoriels $X_j = (K(I)\partial_\theta)_j$. Tous les commutateurs d'ordre supérieur ne permettent que d'obtenir des combinaisons linéaires des X_j et des $\partial_{r_{i,m}}$. Pour que l'algèbre de Lie engendrée par les commutateurs soit de rang maximal, il faut donc que le rang de $K(I)$ soit de N. Ceci démontre l'unicité de la mesure invariante.

Pour montrer qu'elle est mélangeante, on suit de nouveau la même démarche qu'avant pour montrer qu'il existe une $(\star)$-séquence $\{t_n\}$ telle que

$$\operatorname*{w-lim}_{n\to\infty} T_{\mathcal{H}}^{t_n} f \equiv \gamma$$

existe pour $f \in \mathcal{C}^2(\tilde{\mathcal{X}})$ et que γ ne dépend pas de r. Il reste donc à montrer que γ ne dépend pas de θ.

Pour ceci, on suit le même raisonnement qu'avant en choisissant de nouveau ψ de la forme $\psi(r,\theta) = \varphi_1(r)\varphi_2(\theta)/h(r,\theta)$ avec $\int \varphi_1(r)\, dr = 0$. L'expression correspondant à (3.11) est alors

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_j \int \bar{\varphi}_0(\theta)\partial_{\theta_j}\gamma\, d\theta \int (\omega_j(I) + \sum_{i,m} K_{ij}(I)\, r_{i,m})\bar{\varphi}_1(r)\, dr \\ &= \sum_{i,j,m} K_{ij}(I) \int \bar{\varphi}_0(\theta)\partial_{\theta_j}\gamma\, d\theta \int r_{i,m}\bar{\varphi}_1(r)\, dr\ . \end{aligned} \tag{4.4}$$

On définit alors les deux vecteurs colonnes a et b par

$$\begin{aligned} a &= (a_i) = \sum_m \int r_{i,m}\bar{\varphi}_1(r)\, dr \\ b &= (b_j) = \int \bar{\varphi}_0(\theta)\partial_{\theta_j}\gamma\ . \end{aligned} \tag{4.5}$$

On a donc $a^T K(I) b = 0$. Pour n'importe quelle valeur de b possible, il existe une fonction φ_0 qui la réalise. On a donc $a^T K(I) = 0$. Si $K(I)$ est de rang N, a doit donc être identiquement nul, ce qui implique que γ ne dépend pas de θ. □

5 Hamiltonien libre quelconque

Dans cette partie du travail, nous allons considérer un Hamiltonien libre quelconque couplé à n bains thermiques de températures différentes. Nous allons néanmoins supposer qu'il existe des intégrales premières du mouvement telles que celui-ci s'effectue sur une sous-variété compacte dans l'espace (p,q).

Il faudra également introduire quelques hypothèses supplémentaires sur l'Hamiltonien du système. Ces hypothèses diront essentiellement que l'action de chaque bain thermique se propage dans tout le système. On évite ainsi les cas "dégénérés" où l'on aurait une partie du système libre totalement découplée de la partie en interaction avec les bains thermiques.

5.1 Formalisme utilisé

Dans toute cette partie du travail, nous désignerons par $\mathcal{M} \approx \mathbb{R}^{2N}$ la variété sur laquelle l'Hamiltonien libre H_L est défini.

Pour une variété différentiable $\mathcal{M}$ quelconque, nous appellerons $T_x\mathcal{M}$ l'espace tangent de $\mathcal{M}$ au point x, $T\mathcal{M}$ la fibrée tangente de $\mathcal{M}$ et $\mathcal{S}^\infty\mathcal{M}$ l'espace des champs de vecteurs $\mathcal{C}^\infty$ sur $\mathcal{M}$. De plus, nous appellerons $\mathcal{S}(\mathcal{M})$ l'espace de Schwartz sur $\mathcal{M}$.

Définition 5.1 *Soit $F \in \mathcal{C}^\infty(\mathcal{M})$. On lui associe un champ vectoriel X^F, appelé* champ hamiltonien *d'hamiltonien F via l'application $\Phi : \mathcal{C}^\infty(\mathcal{M}) \to \mathcal{S}^\infty\mathcal{M}$ définie par*

$$\Phi : F \mapsto X^F = \sum_j \Big((\partial_{p_j}F)\partial_{q_j} - (\partial_{q_j}F)\partial_{p_j}\Big)\ .$$

Une propriété immédiate des X^F est que $dG(X^F) = X^F(G) = \{F, G\}$, où $\{\cdot, \cdot\}$ désigne le crochet de Poisson (voir aussi [A]). On déduit de ceci la relation

$$[X^{F_1}, X^{F_2}] = X^{\{F_1,F_2\}} . \tag{5.1}$$

En effet, on a

$$[X^{F_1}, X^{F_2}](G) = \{F_1, \{F_2, G\}\} - \{F_2, \{F_1, G\}\} = \{\{F_1, F_2\}, G\} = X^{\{F_1,F_2\}}(G) ,$$

ce qui démontre la relation cherchée. Voici encore une définition utile.

Définition 5.2 *Soient $\mathcal{M}$ une variété différentiable, $\mathcal{R}$ l'anneau des fonctions dans $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M})$ et $\mathcal{A} \subset \mathcal{C}^\infty(\mathcal{M})$ une famille finie de fonctions sur $\mathcal{M}$. Nous définissons alors $M_{\mathcal{M}}(\mathcal{A}) \subset \mathcal{S}^\infty\mathcal{M}$ comme le $\mathcal{R}$-sous-module de $\mathcal{S}^\infty\mathcal{M}$ engendré par les champs de vecteurs de la forme X^A avec $A \in \mathcal{A}$.*

5.2 Présentation du modèle et équations du mouvement

L'Hamiltonien total que nous allons considérer est donné par

$$H(p, q, \varphi) = H_L(p, q) + \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2}\|\varphi_i\|_{\mathcal{H}}^2 + \sum_{i=1}^{n} F_i(p, q)\langle\alpha_i, \varphi_i\rangle_{\mathcal{H}} ,$$

où $\{H_L, F_1, \ldots, F_n\}$ est un ensemble de fonctions dans $\mathcal{C}^\infty(\mathcal{M})$. A partir de cet Hamiltonien, nous définissons les ensembles suivants :

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_0 &= \Big\{F_i,\ i = 1, \ldots, n\Big\} ,\\
\mathcal{G}_1 &= \Big\{\{F_i, H_L\},\ i = 1, \ldots, n\Big\} ,\\
\mathcal{G}_2 &= \Big\{\{\{F_i, H_L\}, H_L\},\ i = 1, \ldots, n\Big\} , \text{ etc.}
\end{aligned} \tag{5.2}$$

De plus, nous allons écrire $\mathcal{G} = \bigcup_k \mathcal{G}_k$. Nous supposons enfin que H satisfait les hypothèses suivantes.

H1. Il existe des fonctions $\{G_i\}_{i=1,\ldots,m'}$ avec $G_i : \mathcal{M} \to \mathbb{R}$ telles que l'on a $\{G_i, H_L\} = \{G_i, F_j\} = 0$ pour toutes les valeurs possibles de i et j. De plus, la sous-variété $\tilde{\mathcal{M}}$ obtenue en fixant les différents G_i est lisse et compacte.

H2. Il existe une famille finie $\mathcal{A} = \{A_i,\ i = 1, \ldots, n'\} \subset \mathcal{G}$ telle que la famille de vecteurs X^A avec $A \in \mathcal{A}$ engendre en tout point $x \in \tilde{\mathcal{M}}$ l'espace tangent $T_x\tilde{\mathcal{M}}$ tout entier. De plus, nous supposerons que si $A \in \mathcal{A} \cap \mathcal{G}_i$ avec $i > 0$, on peut écrire A comme $\{B, H_L\}$ avec $B \in \mathcal{A} \cap \bigcup_{k<i} \mathcal{G}_k$ et $[X^B, X^{F_j}] \in M_{\tilde{\mathcal{M}}}(\bigcup_{k<i} \mathcal{G}_k)\ \forall j$.

Définition 5.3 *Nous dirons que le système considéré est de* rang R, *où R est le plus petit entier tel que $\mathcal{A} \cap \mathcal{G}_k = \phi$ pour tout $k > R$.*

Nous munissons $\tilde{\mathcal{M}}$ de la mesure dm induite par la mesure de Lebesgue sur $\mathcal{M}$. Les opérateurs du type X^A avec $A \in \mathcal{A}$ peuvent alors être interprétés comme des opérateurs agissant sur $\mathcal{C}^\infty(\tilde{\mathcal{M}})$. Ceci vient directement de **H1** et de la définition de $\mathcal{G}$. De plus, ce sont des opérateurs antisymétriques.

Définition 5.4 *Une fonction F de $\mathcal{M}$ dans $\mathbb{R}$ est dite* acceptable *si F est $\mathcal{C}^\infty$ et que $\{F, G_i\} = 0$ pour toutes les valeurs de i possibles. X^F peut alors être interprété comme un opérateur agissant sur $\mathcal{C}^\infty(\tilde{\mathcal{M}})$.*

En utilisant l'hypothèse **H2**, on peut encore démontrer la proposition suivante.

Proposition 5.5 $M_{\tilde{\mathcal{M}}}(\mathcal{A}) = \mathcal{S}^\infty\tilde{\mathcal{M}}$.

Démonstration. On doit montrer que $\mathcal{S}^\infty\tilde{\mathcal{M}} \subset M_{\tilde{\mathcal{M}}}(\mathcal{A})$. Prenons $X \in \mathcal{S}^\infty\tilde{\mathcal{M}}$ et $x \in \tilde{\mathcal{M}}$ quelconques. On peut montrer qu'il existe alors un voisinage V_x de x et des fonctions infiniment différentiables $f_A : V_x \to \mathbb{R}$, telles que l'on ait

$$X(y) = \sum_{A\in\mathcal{A}} f_A(y)X^A(y) \qquad \forall\, y \in V_x\ .$$

Ceci découle immédiatement du fait que, si le rang d'une famille de champs de vecteurs $\mathcal{C}^\infty$ vaut r en un point donné x, il existe un voisinage de x tel que le rang vaut r partout dans ce voisinage.

Comme $\tilde{\mathcal{M}}$ est compact, on peut choisir un nombre fini de points x_i tels que les voisinages V_i correspondants forment un recouvrement fini de $\tilde{\mathcal{M}}$. On a donc des fonctions f_A^i telles que, si $y \in V_i$, on a

$$X(y) = \sum_{A\in\mathcal{A}} f_A^i(y)X^A(y)\ .$$

On sait de plus qu'il existe une partition de l'unité par des fonctions $\lambda_i \in \mathcal{C}^\infty(\tilde{\mathcal{M}})$ telles que, pour tout i, le support de λ_i soit inclus dans V_i.

On a alors, pour tout $y \in \tilde{\mathcal{M}}$, la relation

$$X(y) = \sum_i \lambda_i(y) \sum_{A\in\mathcal{A}} f_A^i(y)X^A(y)\ ,$$

où les f_A^i ont été prolongées à 0 en-dehors des V_i. On a donc $X \in M_{\tilde{\mathcal{M}}}(\mathcal{A})$. □

Afin de simplifier les notations par la suite, nous allons écrire $\kappa_i^2 = \lambda_i^2\gamma_i/\beta_i$. De plus, par rapport aux parties précédentes, nous allons nous restreindre au cas $M = 1$. Le cas $M \neq 1$ se traite de la même manière, mais les notations deviennent vraiment lourdes. En effectuant un calcul similaire à ce que nous avons maintenant l'habitude de faire, nous trouvons pour les équations du mouvement

$$\begin{aligned}
dq_j &= \partial_{p_j} H_L(p,q)\,dt + \sum_i \partial_{p_j} F_i(p,q) r_i\,dt\ ,\\
dp_j &= -\partial_{q_j} H_L(p,q)\,dt - \sum_i \partial_{q_j} F_i(p,q) r_i\,dt\ ,\\
dr_i &= -\gamma_i r_i\,dt - \lambda_i^2\gamma_i F_i(p,q)\,dt - \sqrt{2}\kappa_i\,dw_i(t)\ .
\end{aligned} \tag{5.3}$$

On a alors

Proposition 5.6 *La solution de (5.3) se trouve sur $\tilde{\mathcal{X}} = \tilde{\mathcal{M}} \times \mathbb{R}^n$ avec probabilité 1 par rapport au processus de Wiener w et pour tous les temps pour lesquels elle existe.*

Démonstration. Le lemme d'Itô (voir par exemple [SZ]) nous dit que, si x obéit à l'équation différentielle stochastique

$$dx = b(x,t)\,dt + \sigma(x,t)\,dw\ ,$$

où x et b sont des vecteurs à n composantes et σ est une matrice $n \times n$, alors une fonction $f(x)$ obéit à l'équation différentielle stochastique

$$df = \sum_i b_i \partial_i f\,dt + \frac{1}{2}\sum_{i,j} A_{ij}\partial_{ij} f\,dt + \sum_i \partial_i f \sigma_{ij}\,dw_j\ ,$$

où on a défini $A = \sigma\sigma^T$. On peut utiliser ce lemme en prenant pour f les fonctions G_i. On vérifie alors par un simple calcul que l'on a

$$dG_i = \{H_L, G_i\}\,dt + \sum_j \{F_j, G_i\}\,r_j\,dt = 0\ ,$$

où la dernière égalité vient de l'hypothèse **H1**. □

En utilisant ceci, on montre

Proposition 5.7 *La solution de (5.3) existe pour tout temps $t > 0$ avec probabilité 1 par rapport au processus de Wiener w.*

Démonstration. On sait maintenant que, tant que cette solution existe, elle reste sur $\tilde{\mathcal{M}}$ dans l'espace (p,q). En ce qui concerne les variables p et q, la solution de l'équation (5.3) existe donc tant que la solution pour les r_i existe.

En considérant l'équation pour les r_i, on voit que les dérivées du membre de droite sont toutes bornées si p et q sont bornées. La solution de (5.3) existe donc pour tout temps et pour tout processus de Wiener w. □

Le générateur L du semigroupe engendré par le système d'équations (5.3), ainsi que son adjoint L^T dans $L^2(\tilde{\mathcal{X}}, dx)$ sont alors donnés par

$$\begin{aligned} L &= \sum_i \kappa_i^2 \left(\partial_{r_i} - \beta_i(F_i(p,q) + r_i/\lambda_i^2)\right)\partial_{r_i} \\ &\quad + X^{H_L} + \sum_i r_i X^{F_i}\ , \\ L^T &= \sum_i \kappa_i^2 \left(\partial_{r_i} + \beta_i(F_i(p,q) + r_i/\lambda_i^2)\right)\partial_{r_i} \\ &\quad - X^{H_L} - \sum_i r_i X^{F_i} + \sum_i \gamma_i\ . \end{aligned} \tag{5.4}$$

On peut montrer que les opérateurs L et L^T sont hypoelliptiques. Ceci est une conséquence directe du fait que les champs de vecteurs X^A engendrent tout l'espace tangent de $\tilde{\mathcal{M}}$.

Par analogie avec les parties précédentes, nous définissons G, l'Hamiltonien effectif du système par

$$G(p,q,r) = H_L(p,q) + \sum_i \left(\frac{r_i^2}{2\lambda_i^2} + F_i(p,q)\,r_i\right)\ .$$

On voit comme avant que si toutes les températures β_i^{-1} sont égales à une certaine température β^{-1}, la mesure $\exp(-\beta G)\,dx$, où $dx = dm\,dr$, est une mesure invariante du système. Si les β_i sont distincts, ce n'est pas aussi simple. Nous allons montrer dans les sections qui suivent qu'il existe une valeur $\delta > 0$ telle que l'on a l'existence et l'unicité d'une mesure invariante de densité $\mathcal{C}^\infty$ si $|\beta_i - \beta_j| < \delta$ pour tout i et j.

5.3 Notations et opérateurs utiles

On se fixe une température $\beta_0 < 2\min\{\beta_i,\ i = 1, \ldots, n\}$. Nous définissons alors l'espace de Hilbert

$$\mathcal{H}_0 = L^2(\tilde{\mathcal{X}}, Z_0^{-1} e^{-\beta_0 G}\,dx)\ ,$$

où Z_0 est une constante de normalisation que l'on choisit de manière à ce que la norme de la fonction constante 1 vale 1. Nous allons noter $L_{\mathcal{H}_0}$ et $L^T_{\mathcal{H}_0}$ les opérateurs L et L^T vus comme opérateurs différentiels dans $\mathcal{H}_0$. Nous définissons de plus les opérateurs suivants dans $L^2(\tilde{\mathcal{X}}, dx)$:

$$\begin{aligned} W_i &= \frac{r_i}{\lambda_i^2} + F_i(p,q)\ , \\ R_i &= \partial_{r_i} + b_i\,W_i\ , \qquad b_i = \sqrt{\tfrac{\beta_0}{2}(\beta_i - \tfrac{\beta_0}{2})}\ , \\ \mathcal{K} &= e^{-\beta_0 G/2} L e^{\beta_0 G/2}\ . \end{aligned} \tag{5.5}$$

Un calcul explicite permet de séparer $\mathcal{K}$ en une partie symétrique et une partie antisymétrique en écrivant

$$\begin{aligned} \mathcal{K} &= \alpha - \sum_i \kappa_i^2 R_i^* R_i\ + K_0\ , \\ K_0 &= X^{H_L} + \sum_i r_i X^{F_i} + \sum_i a_i(\partial_{r_i}\cdot W_i + W_i \cdot \partial_{r_i})\ . \end{aligned} \tag{5.6}$$

Dans cette expression, α et a_i sont des constantes dépendant de β_i, λ_i et γ_i. L'opérateur $\mathcal{K}$ est unitairement équivalent à l'opérateur $L_{\mathcal{H}_0}$. Ceci vient du fait que si $f \in L^2(\tilde{\mathcal{X}}, dx)$, alors $\exp(\beta_0 G/2) f \in \mathcal{H}_0$. On définit à partir de ceci l'opérateur K par

$$K = \alpha - \mathcal{K} = \sum_i \kappa_i^2 R_i^* R_i\ - K_0\ .$$

Nous allons dans la suite utiliser aussi une autre manière de couper K en deux. On écrira $K = K_1 + K_2$ avec

$$\begin{aligned} K_1 &= \sum_i \kappa_i^2 R_i^* R_i\ - X^{H_L} - \sum_i a_i(\partial_{r_i}\cdot W_i + W_i\cdot\partial_{r_i})\ , \\ K_2 &= -\sum_i r_i X^{F_i}\ . \end{aligned} \tag{5.7}$$

On définit de plus l'opérateur Λ par

$$\Lambda^2 = \tau + \sum_i R_i^* R_i\ - \sum_{A\in\mathcal{A}} X^A X^A\ ,$$

où τ est une constante réelle positive que nous allons fixer par la suite. On voit que Λ^2 est un opérateur autoadjoint plus grand que τ. En particulier, l'opérateur $\Lambda^{-\varepsilon}$ est borné pour tout $\varepsilon > 0$. De plus, on a

Proposition 5.8 Λ^2 *est à résolvante compacte.*

Démonstration. Pour montrer ceci, on utilise le fait que si A_1 est un opérateur autoadjoint à résolvante compacte borné inférieurement et que A_2 est un opérateur autoadjoint défini positif, alors $A_1 + A_2$ est également à résolvante compacte. Ceci se voit en utilisant le fait que "A est à résolvante compacte" est équivalent à "le spectre essentiel de A est vide" et le principe min-max (voir par exemple [RS]).

On écrit alors

$$R_i^* R_i = -\partial_{r_i}^2 + b_i^2 \Big(\frac{r_i}{\lambda_i^2} + F_i(p,q) \Big)^2 + \frac{b_i}{\lambda_i^2} \; .$$

Comme $\tilde{\mathcal{M}}$ est compacte, il existe une constante k telle que $|F_i(p,q)| < k$ pour tout i. On utilise alors le fait que $(x \pm a)^2 \geq x^2/2 - a^2$ pour montrer qu'il existe une constante C telle que $R_i^* R_i$ peut s'écrire comme

$$R_i^* R_i = -\partial_{r_i}^2 + b_i^2 \frac{r_i^2}{2\lambda_i^4} - C + B \; , \tag{5.8}$$

où B est un opérateur positif. De plus, l'opérateur $-\sum_{A \in \mathcal{A}} X^A X^A$ est, du fait de la Proposition 5.5, strictement plus grand qu'un multiple de Δ, l'opérateur Laplacien sur $\tilde{\mathcal{M}}$.

On peut donc finalment écrire

$$\Lambda^2 = \sum_{i=1}^{n} (-\partial_{r_i}^2 + c_i r_i^2) - c_0 \Delta - C + B \; ,$$

où les c_i sont des constantes strictement positives, B est un opérateur positif et C est une constante quelconque. Les opérateurs $-\partial_{r_i}^2 + c_i r_i^2$, vus comme opérateurs agissant sur $L^2(\mathbb{R})$ sont à résolvante compacte. De plus, l'opérateur Δ vu comme opérateur agissant sur $L^2(\tilde{\mathcal{M}})$ est également à résolvante compacte (voir [Ch]). Ceci démontre la proposition. □

Un simple calcul permet alors d'obtenir, si F est une fonction acceptable quelconque, les règles de commutation

$$\begin{aligned}
[X^F, R_i] &= b_i \{F, F_i\} = [X^F, R_i^*] \; , \\
[R_i, K_0] &= X^{F_i} + (2a_i/\lambda_i^2) R_i^* + b_i \{F_i, H_L\} + b_i \textstyle\sum_j r_j \{F_i, F_j\} \; , \\
[X^F, K_0] &= X^{\{F, H_L\}} + \textstyle\sum_i r_i X^{\{F, F_i\}} + 2 \textstyle\sum_i a_i \{F, F_i\} \partial_{r_i} \; ,
\end{aligned} \tag{5.9}$$

qui nous seront utiles par la suite. Dans la suite du travail, nous travaillerons toujours dans $L^2(\tilde{\mathcal{X}}, dx)$. Les normes et produits scalaires que nous écrirons seront toujours les normes et produits scalaires standards de L^2.

5.4 Résultats

Le résultat principal de ce travail est

Théorème 5.9 *Sous les hypothèses* **H1** *et* **H2**, *les opérateurs* $L_{\mathcal{H}_0}$ *et* $L^T_{\mathcal{H}_0}$ *sont à résolvante compacte.*

La démonstration de ce théorème se fait de la même manière que dans [EPR, R-B] en utilisant les propositions qui vont suivre. La différence dans l'énoncé est que l'on n'a pas de restriction sur les constantes de couplage λ_i. Ceci est une conséquence directe du fait que le mouvement des variables (p, q) reste borné à $\tilde{\mathcal{M}}$ qui est compact.

Le résultat principal dont on pourra tirer le Théorème 5.9 est le lemme suivant.

Lemme 5.10 *Sous les hypothèses* **H1** *et* **H2**, *il existe des constantes* $\tau_0 > 0$, $\varepsilon > 0$ *et* $C > 0$ *telles que si on prend* $\tau > \tau_0$, *l'on a l'estimation*

$$\|\Lambda^\varepsilon f\| \leq C(\|Kf\| + \|f\|)$$

pour toutes les fonctions $f \in \mathcal{S}(\tilde{\mathcal{X}})$.

Cette estimation sera une conséquence de

Lemme 5.11 *Il existe des constantes* $\tau_0 > 0$ *et* $C > 0$ *telles que, si on prend* $\tau > \tau_0$, *les estimations*

$$\|\Lambda^{\varepsilon_i - 1} X^A f\| \leq C(\|Kf\| + \|f\|) \qquad A \in \mathcal{A} \cap \mathcal{G}_i\ , \tag{5.10}$$

$$\|R_i f\| \leq C(\|Kf\| + \|f\|) \qquad i = 1, \ldots, n\ , \tag{5.11}$$

où $\varepsilon_i = 4^{-i-1}$, *soient valables pour tout* $f \in \mathcal{S}(\tilde{\mathcal{X}})$.

Remarque. L'estimation (5.11) vaut aussi bien en remplaçant R_i par R_i^*. On peut voir ceci facilement en utilisant le fait que le commutateur $[R_i, R_i^*]$ est une constante. L'estimation (5.10) vaut également en remplaçant X^A par n'importe quel opérateur X dans $M_{\tilde{\mathcal{M}}}(\mathcal{A} \cap \mathcal{G}_i)$. Ceci se voit en utilisant le fait que $[\Lambda^{\varepsilon - 1}, g]\Lambda$ est borné si g est une fonction dans $\mathcal{C}^\infty(\tilde{\mathcal{M}})$, ce qui sera une conséquence de la Proposition 6.2.

La démonstration du Lemme 5.11 sera donnée dans la Section 6 de ce travail. Cette démonstration utilisera un nombre incalculable de fois le

Lemme 5.12 *Soit* F *une fonction acceptable et soit* Z *un des opérateurs* X^F, r_i, R_i *ou* R_i^*. *Alors il existe* $\tau_0 > 0$ *tel que, si on choisit* $\tau > \tau_0$, *les opérateurs suivants soient bornés :*

$$\Lambda^\beta Z \Lambda^\gamma \qquad si \qquad \beta + \gamma \leq -1\ , \tag{5.12}$$

$$\Lambda^\beta [Z, \Lambda^{-\alpha}] \Lambda^\gamma \qquad si \qquad \beta + \gamma \leq \alpha + 1\ , \tag{5.13}$$

$$\Lambda^\beta [K_1, Z] \Lambda^\gamma \qquad si \qquad \beta + \gamma \leq -1\ , \tag{5.14}$$

$$\Lambda^\beta [K_1, \Lambda^{-\alpha}] \Lambda^\gamma \qquad si \qquad \beta + \gamma \leq \alpha\ . \tag{5.15}$$

La démonstration de ce lemme sera également donnée dans la Section 6 de ce travail.

Démonstration du Lemme 5.10. On prend $\varepsilon = 4^{-R-1}$. On a alors

$$\begin{aligned}
\|\Lambda^\varepsilon f\|^2 &= \langle \Lambda^{\varepsilon-1} f, \Lambda^{\varepsilon-1}\Lambda^2 f\rangle = \tau\langle \Lambda^{\varepsilon-1} f, \Lambda^{\varepsilon-1} f\rangle + \textstyle\sum_i \langle \Lambda^{\varepsilon-1} f, \Lambda^{\varepsilon-1} R_i^* R_i f\rangle \\
&\quad - \textstyle\sum_{A\in\mathcal{A}} \langle \Lambda^{\varepsilon-1} f, \Lambda^{\varepsilon-1} X^A X^A f\rangle \\
&\le \tau \|\Lambda^{\varepsilon-1} f\|^2 + \textstyle\sum_i \|\Lambda^{\varepsilon-1} R_i f\|^2 + \sum_A \|\Lambda^{\varepsilon-1} X^A f\|^2 \\
&\quad + \textstyle\sum_i |\langle f, [\Lambda^{2\varepsilon-2}, R_i^*] R_i f\rangle| + \sum_A |\langle f, [\Lambda^{2\varepsilon-2}, X^A]\Lambda\Lambda^{-1} X^A f\rangle| \;.
\end{aligned} \tag{5.16}$$

Les Lemmes 5.11 et 5.12 permettent d'avoir les bonnes bornes sur ces termes. □

Ceci permet de démontrer le Théorème 5.9 de la même manière que dans [EPR, R-B]. En effet, comme Λ^ε est à résolvante compacte, $(\mathcal{K}-\alpha-1)^*(\mathcal{K}-\alpha-1)$ l'est également par le critère de Rellich (voir p.ex. [RS, Théorème XII.67]). Comme $\mathcal{K}-\alpha-1$ est strictement m-accrétif, son inverse existe et donc l'opérateur $((\mathcal{K}-\alpha-1)^*(\mathcal{K}-\alpha-1))^{-1} = (\mathcal{K}-\alpha-1)^{-1}((\mathcal{K}-\alpha-1)^*)^{-1}$ existe et est également compact. Ceci implique à son tour que $(\mathcal{K}-\alpha-1)^{-1}$ est compact et donc que $\mathcal{K}$ est à résolvante compacte, ce que l'on voulait démontrer.

On peut également reprendre pas à pas les démonstrations du Lemme 3.7 et du Théorème 3.8 de [EPR, R-B] pour montrer que si les écarts de température entre les différents bains thermiques ne sont pas trop grands, il existe une unique mesure invariante pour notre système. La démarche pour montrer ceci est la suivante :

- On montre que 0 reste une valeur propre isolée de l'opérateur $L^T_{\mathcal{H}_0}$ lorsque les écarts de température entre les différents bains sont suffisamment petits. Ceci démontre l'existence d'une mesure invariante μ de densité lisse par rapport à la mesure de Lebesgue.
- Pour montrer l'unicité de μ, on suppose par l'absurde qu'il existe une deuxième mesure invariante ν. Comme ν et μ doivent être de supports disjoints, il existe un ensemble A de mesure de Lebesgue non-nulle tel que $\nu(A) > 0$ et $\mu(A) = 0$. Si χ_A est la fonction caractéristique de A, on note alors

  $$c(x) = \lim_{s\to\infty} \frac{1}{s}\int_0^s T^t \chi_A(x)\, dt \;,$$

  et on montre que cette limite ne dépend pas de x. On peut donc écrire $c = c(x)$. On arrive alors à une contradiction en montrant d'une part que $c = \mu(A) = 0$ et d'autre part que

  $$\langle \chi_A, c\rangle = \nu(A) \int Z_0^{-1} \exp(-\beta_0 G)\chi_A(x)\, dx > 0 \;,$$

  ce qui démontre l'unicité.

Il est probable que ce résultat soit encore vrai pour des écarts de température quelconques. Cette affirmation est motivée par les résultats démontrés dans [EPR2]. Néanmoins, la démonstration qui y est donnée ne peut pas être appliquée sans autre à notre problème, car elle utilise de manière cruciale la forme de l'Hamiltonien. Cependant, il est plausible qu'elle puisse être modifiée pour s'adapter au cas que nous considérons.

6 Démonstration des lemmes techniques

6.1 Démonstration du Lemme 5.12

Dans cette partie, nous allons démontrer un lemme formulé de manière assez abstraite. Le Lemme 5.12 en découlera immédiatement comme un cas particulier. Fixons dans un premier temps le cadre dans lequel nous allons travailler.

On se donne un espace de Hilbert $\mathcal{H}$ et une famille finie $X = \{X_i\}_{i=1}^N$ d'opérateurs linéaires sur $\mathcal{H}$. On se donne également un sous-anneau $\mathcal{F}$ de l'anneau constitué des opérateurs linéaires bornés sur $\mathcal{H}$. Nous allons faire sur X et $\mathcal{F}$ les hypothèses suivantes

- Si $X_i \in X$, on peut écrire son adoint X_i^* sous la forme $X_i^* = \sum_{i=1}^N b_{ij} X_j$ avec $b_{ij} \in \mathcal{F}$.
- Si $X_i, X_j \in X$, on peut écrire $[X_i, X_j] = \sum_{k=1}^N a_{ijk} X_k$ avec $a_{ijk} \in \mathcal{F}$.
- Si $f \in \mathcal{F}$ et $X_i \in X$. alors $[f, X_i] \in \mathcal{F}$ et $f^* \in \mathcal{F}$.

A partir de ceci, on construit l'espace vectoriel $\mathcal{Y}$ engendré par les opérateurs de la forme

$$Y = f\, X_{i_1} \cdot \ldots \cdot X_{i_m} \ ,$$

où $X_{i_j} \in X$ pour tout j et $f \in \mathcal{F}$. Nous dirons que Y est de degré m. Nous appellerons de plus $\mathcal{Y}^s$ le sous-espace engendré par les opérateurs de degré plus petit ou égal à s. On définit l'opérateur Λ^2 par

$$\Lambda^2 = \tau + \sum_{i=1}^N X_i^* X_i \ , \tag{6.1}$$

où τ est un nombre réel.

On voit que, avec ces notations, on a $\Lambda^2 \in \mathcal{Y}^2$. De plus, si $Y_1 \in \mathcal{Y}^s$ et $Y_2 \in \mathcal{Y}^t$ avec $s + t > 0$, on a $[Y_1, Y_2] \in \mathcal{Y}^{s+t-1}$ et $Y_1 Y_2 \in \mathcal{Y}^{s+t}$. Ceci découle des règles de commutation entre les X_i. Enfin, si $Y \in \mathcal{Y}^s$, on a également $Y^* \in \mathcal{Y}^s$.

Proposition 6.1 *Soient X et $\mathcal{F}$ comme plus haut. Alors il existe τ_0 tel que, pour tout $\tau > \tau_0$, les opérateurs $X_i \Lambda^{-1}$ et $X_i X_j \Lambda^{-2}$ soient bornés pour toutes les valeurs de i et j possibles.*

Démonstration. Montrons d'abord que $X_i \Lambda^{-1}$ est borné. Ceci revient à montrer qu'il existe une constante C telle que l'on ait

$$\|X_i u\|^2 \le C \|\Lambda u\|^2 \qquad \forall\, u \in \mathcal{H} \ .$$

Ceci découle directement de la relation

$$\|\Lambda u\|^2 = \tau \|u\|^2 + \sum_{i=1}^N \|X_i u\|^2 \ .$$

Pour montrer que $X_i X_j \Lambda^{-2}$ est borné, il faut trouver une constante C telle que

$$\|X_i X_j u\|^2 \le C \|\Lambda^2 u\|^2 \qquad \forall\, u \in \mathcal{H} \ . \tag{6.2}$$

On a

$$\begin{aligned} \|\Lambda^2 u\|^2 &= \langle u, \Lambda^4 u\rangle = \tau^2\|u\|^2 + 2\tau \textstyle\sum_i \|X_i u\|^2 + \sum_{i,j}\langle u, X_i^* X_i\, X_j^* X_j\, u\rangle \\ &= \tau^2\|u\|^2 + 2\tau \textstyle\sum_i \|X_i u\|^2 + \sum_{i,j}\|X_i X_j u\|^2 + \sum_{i,j}\langle u, [X_i^* X_i\,, X_j^*] X_j u\rangle\ . \end{aligned} \tag{6.3}$$

Dans cette expression, on peut récrire le terme faisant intervenir un commutateur comme

$$\langle u, [X_i^* X_i\,, X_j^*] X_j u\rangle = \langle X_i u, [X_i, X_j^*] X_j u\rangle + \langle [X_j, X_i] u, X_i X_j u\rangle\ .$$

Du fait des deux hypothèses que nous avons faites sur les opérateurs X_i, il existe donc des constantes C_{ijk} positives telles que l'on a

$$\|\Lambda^2 u\|^2 \geq \tau^2\|u\|^2 + 2\tau \sum_i \|X_i u\|^2 + \sum_{i,j}\|X_i X_j u\|^2 - \sum_{i,j,k} C_{ijk}\|X_i u\|\,\|X_j X_k u\|\ .$$

On utilise maintenant le fait que, pour n'importe quelles valeurs x, y et s positives, on a l'inégalité $2xy \leq x^2 s^2 + y^2/s^2$. Il existe donc des constantes a et b positives telles que l'estimation

$$\|\Lambda^2 u\|^2 \geq \tau^2\|u\|^2 + \Big(2\tau - \frac{a}{s^2}\Big)\sum_i \|X_i u\|^2 + (1 - bs^2)\sum_{i,j}\|X_i X_j u\|^2$$

soit valable pour n'importe quelle valeur de s. Avec le choix

$$s = \frac{1}{\sqrt{2b}}\ ,$$

on a pour $\tau \geq ab + 1$ l'estimation

$$\|\Lambda^2 u\|^2 \geq \tau^2\|u\|^2 + \frac{1}{2}\sum_i \|X_i u\|^2 + \frac{1}{2}\sum_{i,j}\|X_i X_j u\|^2\ . \tag{6.4}$$

On en déduit immédiatement la relation (6.2) avec $C = 2$. □

Nous allons maintenant faire usage de la machinerie développée dans [R-B, Appendix B] en la généralisant un petit peu. Nous nous mettons toujours dans la même situation. On a alors la proposition suivante

Proposition 6.2 *Considérons $Y \in \mathcal{Y}^j$ avec $j \in \{0, 1, \ldots\}$ quelconque et Λ^2 comme défini dans (6.1) avec τ plus grand que le τ_0 de la Proposition 6.1. Alors,*

$$\Lambda^\beta Y \Lambda^\gamma \tag{6.5}$$

est un opérateur borné sur $\mathcal{H}$ lorsque $\beta + \gamma \leq -j$.

Soit Z un opérateur dans $\mathcal{Y}$ avec $[Z, \Lambda^2] \in \mathcal{Y}^j$ pour un certain j. Alors,

$$\Lambda^\beta [\Lambda^{-\alpha}, Z] \Lambda^\gamma \tag{6.6}$$

est un opérateur borné sur $\mathcal{H}$ lorsque $\beta + \gamma \leq \alpha - j + 2$.

Démonstration. Il suffira de démontrer que l'opérateur (6.5) est borné pour le cas $\beta = 0$ et $\gamma = -j$. Le reste de la démonstration se fait exactement de la même manière que dans [EPR, R-B].

Nous avons déjà démontré cette estimation pour les cas $j = 1$ et $j = 2$. Pour les cas $j > 2$, on procède par récurrence. Supposons que $Y\Lambda^{-k}$ soit borné si $Y \in \mathcal{Y}^k$ pour tout $k < j$. On veut alors montrer que l'opérateur

$$X_{i_1} \cdot \ldots \cdot X_{i_j} \Lambda^{-j} \tag{6.7}$$

est borné. On distingue deux cas.

- $j = 2n$. On écrit alors (6.7) sous la forme

  $$X_{i_1} X_{i_2} \Lambda^{-2} \cdot \Lambda^2 X_{i_3} X_{i_4} \Lambda^{-4} \cdot \ldots \cdot \Lambda^{2n-2} X_{i_{2n-1}} X_{i_{2n}} \Lambda^{-2n} .$$

  Il s'agit donc de montrer que les opérateurs de la forme

  $$\Lambda^{2m-2} X_i X_j \Lambda^{-2m} ,$$

  avec $m \leq n$, sont bornés. On écrit

  $$\Lambda^{2m-2} X_i X_j \Lambda^{-2m} = X_i X_j \Lambda^{-2} + [\Lambda^{2m-2}, X_i X_j] \Lambda^{-2m+1} \Lambda^{-1} .$$

  Le premier terme est borné par la Proposition 6.1. Le deuxième est borné par l'hypothèse de récurrence en remarquant que $[\Lambda^{2m-2}, X_i X_j] \in \mathcal{Y}^{2m-1}$.

- $j = 2n + 1$. On écrit alors (6.7) sous la forme

  $$X_{i_1} X_{i_2} \Lambda^{-2} \cdot \Lambda^2 X_{i_3} X_{i_4} \Lambda^{-4} \cdot \ldots \cdot \Lambda^{2n} X_{i_{2n+1}} \Lambda^{-2n-1} .$$

  Les premiers termes du produit se bornent exactement comme avant. Pour le dernier terme, on a

  $$\Lambda^{2n} X_{i_{2n+1}} \Lambda^{-2n-1} = X_{i_{2n+1}} \Lambda^{-1} + [\Lambda^{2n}, X_{i_{2n+1}}] \Lambda^{-2n} \Lambda^{-1} ,$$

  ce qui est borné en utilisant l'hypothèse de récurrence.

Ceci démontre la proposition. □

Ceci nous permet aisément de prouver le Lemme 5.12. En effet, on remarque que l'on se trouve dans la situation des lemmes qui précèdent en prenant à la place des X_i les opérateurs X^A, ∂_{r_i} et r_i. La famille d'opérateurs $\mathcal{F}$ est constituée des fonctions dans $\mathcal{C}^\infty(\tilde{\mathcal{M}})$. On utilise la Proposition 5.6 pour montrer que l'on a bien les règles de commutation voulues pour les X^A.

Soit alors Z un des opérateurs X^F, r_i, R_i ou R_i^*. Par définition, on a $Z \in \mathcal{Y}^1$. De plus, un calcul explicite montre que les opérateurs de la forme $[Z, K_1]$ sont dans $\mathcal{Y}^1$ et que l'opérateur $[\Lambda^2, K_1]$ est dans $\mathcal{Y}^2$. Ceci démonte le Lemme 5.12.

6.2 Démonstration du Lemme 5.11

Les différentes étapes de cette démonstration vont s'inspirer largement de la démonstration du Lemme 4.4 dans [EPR, R-B]. Lorsque, dans cette partie du travail, nous écrirons C, il faut lire “il existe une constante $C > 0$ telle que”. D'un terme à l'autre d'une même équation, le symbole C peut donc désigner des constantes différentes. De plus, la lettre f désignera une fonction quelconque dans $\mathcal{S}(\tilde{\mathcal{X}})$, l'espace de Schwartz.

On a alors

$$\|R_i f\|^2 = \langle f, R_i^* R_i f\rangle \le C\,\mathrm{Re}\,\langle f, Kf\rangle \le C\|Kf\|\,\|f\| \le C(\|Kf\| + \|f\|)^2 \,, \tag{6.8}$$

ce qui démontre l'inégalité (5.11). La dernière inégalité vient du fait que $2|ab| \le a^2 + b^2$. Nous utiliserons très souvent cette inégalité par la suite, sans le dire explicitement.

Avant de montrer l'inégalité (5.10), nous allons encore faire une estimation sur $\|r_i f\|^2$. On écrit

$$\|r_i f\|^2 = \langle f, r_i^2 f\rangle \le C\langle f, R_i^* R_i f\rangle + C\langle f, f\rangle \le C(\|Kf\| + \|f\|)^2 \,, \tag{6.9}$$

où l'avant-dernière égalité a été obtenue en utilisant (5.8).

Nous allons maintenant vérifier l'estimation (5.10) en procédant par récurrence. Fixons $i > 0$ et ε suffisamment petit pour que (5.10) soit vérifiée pour tout $k < i$ et pour $\varepsilon_k \ge 4\varepsilon$. On a donc par l'hypothèse de récurrence

$$\|\Lambda^{4\varepsilon-1} X f\| \le C(\|Kf\| + \|f\|)^2 \,, \qquad \forall\, X \in M_{\tilde{\mathcal{M}}}(\bigcup_{k<i} \mathcal{G}_k) \,.$$

Prenons $A \in \mathcal{A} \cap \mathcal{G}_i$. Par l'hypothèse **H2**, il existe une fonction B dans $\bigcup_{k<i} \mathcal{G}_k$, telle que $A = \{H_L, B\}$. On peut alors écrire à l'aide de (5.9)

$$[K_0, X^B] = X^A + \sum_i r_i [X^{F_i}, X^B] + \sum_i 2a_i \partial_{r_i} \{F_i, B\} \,.$$

Nous définissons alors la fonction $Z = \{F_i, B\}$. On a donc

$$\begin{aligned} \|\Lambda^{\varepsilon-1} X^A f\|^2 \;\le\;& |\langle [K_0, X^B] f, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f\rangle| + C \sum_i |\langle r_i f, X^Z \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f\rangle| \\ &+ C \sum_i |\langle \Lambda^{-1} \partial_{r_i} f, \Lambda^{2\varepsilon-1} Z f\rangle| = T_1 + T_2 + T_3 \,. \end{aligned} \tag{6.10}$$

Le terme T_3 est facilement borné par $C(\|Kf\| + \|f\|)^2$ en utilisant le Lemme 5.12. Le terme T_2 se borne en écrivant

$$X^Z \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A = \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A \Lambda^{1-2\varepsilon} \Lambda^{2\varepsilon-1} X^Z + [X^Z, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] \,.$$

Les termes obtenus ainsi se bornent par $C(\|Kf\| + \|f\|)^2$ en développant encore le commutateur et en utilisant l'hypothèse de récurrence, ainsi que le Lemme 5.12.

Il reste à estimer le terme T_1. On peut récrire le commutateur comme

$$\begin{aligned} [K_0, X^B] \;&=\; -X^B K - K^* X^B + \frac{1}{2}\Big(X^B (K + K^*) + (K + K^*) X^B\Big) \\ &\equiv\; X_4 + X_5 + X_6 \,. \end{aligned}$$

Nous allons maintenant estimer séparément les trois termes T_3, T_4 et T_5 qui en résultent.

Terme T_4. On a

$$\begin{aligned} T_4 &= |\langle X^B K f, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f\rangle| = |\langle Kf, X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f\rangle| \\ &\leq |\langle Kf, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A \Lambda^{1-4\varepsilon} \Lambda^{4\varepsilon-1} X^B f\rangle| + |\langle Kf, [X^B, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] f\rangle| \\ &\equiv T_{4,1} + T_{4,2} \ . \end{aligned} \tag{6.11}$$

Le terme $T_{4,1}$ est borné par $C(\|Kf\| + \|f\|)^2$ en utilisant l'hypothèse de récurrence et le Lemme 5.12. Le commutateur du terme $T_{4,2}$ peut s'écrire comme

$$[X^B, \Lambda^{2\varepsilon-2}] \Lambda \Lambda^{-1} X^A + \Lambda^{2\varepsilon-2} [X^B, X^A] \ .$$

Les deux termes qui en résultent sont bornés par $C(\|Kf\|+\|f\|)^2$ en utilisant le Lemme 5.12.

Terme T_5. On a

$$\begin{aligned} T_5 &= |\langle K^* X^B f, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f\rangle| = |\langle \Lambda^{4\varepsilon-1} X^B f, \Lambda^{1-4\varepsilon} K \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f\rangle| \\ &\leq |\langle \Lambda^{4\varepsilon-1} X^B f, \Lambda^{-2\varepsilon-1} X^A K f\rangle| + |\langle \Lambda^{4\varepsilon-1} X^B f, \Lambda^{1-4\varepsilon} [K, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] f\rangle| \\ &\equiv T_{5,1} + T_{5,2} \ . \end{aligned} \tag{6.12}$$

Le terme $T_{5,1}$ est borné par $C(\|Kf\| + \|f\|)^2$ en utilisant l'hypothèse de récurrence et le fait que $\Lambda^{-2\varepsilon-1} X^A$ est un opérateur borné. On peut récrire l'opérateur intervenant dans le terme $T_{5,2}$ comme

$$\Lambda^{1-4\varepsilon}[K, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] = \Lambda^{-2\varepsilon-1}[K_1, X^A] + \Lambda^{1-4\varepsilon}[K_1, \Lambda^{2\varepsilon-2}] \Lambda \Lambda^{-1} X^A + \Lambda^{1-4\varepsilon}[K_2, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] \ .$$

Les termes résultant des deux premiers opérateurs sont bornés par $C(\|Kf\| + \|f\|)^2$ en utilisant le Lemme 5.12. Le terme $T_{5,3} \equiv |\langle \Lambda^{4\varepsilon-1} X^B f, \Lambda^{1-4\varepsilon}[K_2, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] f\rangle|$ venant du dernier opérateur est borné en écrivant

$$\begin{aligned} T_{5,3} &\leq \sum_i |\langle \Lambda^{4\varepsilon-1} X^B f, \Lambda^{1-4\varepsilon} [r_i X^{F_i}, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] f\rangle| \\ &\leq \sum_i |\langle \Lambda^{4\varepsilon-1} X^B f, \Lambda^{1-4\varepsilon} X^{F_i} \Lambda^{4\varepsilon-2} \Lambda^{2-4\varepsilon} [r_i, \Lambda^{2\varepsilon-2}] \Lambda \Lambda^{-1} X^A f\rangle| \\ &\quad + \sum_i |\langle \Lambda^{4\varepsilon-1} X^B f, \Lambda^{1-4\varepsilon} [X^{F_i}, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] r_i f\rangle| = T_{5,4} + T_{5,5} \ . \end{aligned} \tag{6.13}$$

Le terme $T_{5,4}$ se borne en utilisant le Lemme 5.12. Le terme $T_{5,5}$ est borné par $C(\|Kf\|+\|f\|)^2$ en récrivant le commutateur comme

$$[X^{F_i}, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] = [X^{F_i}, \Lambda^{2\varepsilon-2}] \Lambda \Lambda^{-1} X^A + \Lambda^{2\varepsilon-2} [X^{F_i}, X^A] \ ,$$

et en utilisant la borne (6.9).

Terme T_6. On a pour ce dernier terme

$$\begin{aligned} T_6 &= \tfrac{1}{2} \langle (X^B (K + K^*) + (K + K^*) X^B) f, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f\rangle \\ &\leq 2 |\langle (\mathrm{Re}\, K) f, X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f\rangle| + |\langle [\mathrm{Re}\, K, X^B] f, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f\rangle| \\ &\equiv T_{6,1} + T_{6,2} \ . \end{aligned} \tag{6.14}$$

Un calcul explicite montre que le commutateur du terme $T_{6,2}$ est formé de termes constitués d'opérateurs bornés multipliant R_i ou R_i^*. On a donc $T_{6,2} \leq C(\|Kf\| + \|f\|)^2$ en utilisant le Lemme 5.12 et l'estimation (6.8). En utilisant la positivité de $\mathrm{Re}\, K$ et l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on peut écrire

$$\begin{aligned} T_{6,1} &= 2|\langle (\mathrm{Re}\, K)^{1/2} f, (\mathrm{Re}\, K)^{1/2} X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f \rangle| \\ &\leq 2\|(\mathrm{Re}\, K)^{1/2} f\| \, \|(\mathrm{Re}\, K)^{1/2} X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f\| \\ &= 2\langle (\mathrm{Re}\, K) f, f\rangle^{1/2} \langle (\mathrm{Re}\, K) X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f, X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f\rangle^{1/2} \\ &\leq 2\sqrt{\mathrm{Re}\,\langle Kf, f\rangle}\sqrt{\mathrm{Re}\,\langle f_1, f_2\rangle} \leq \sqrt{\|Kf\|\,\|f\|}\sqrt{\|f_1\|\,\|f_2\|} \\ &\leq \sqrt{2}(\|Kf\| + \|f\|)\sqrt{\|f_1\|\,\|f_2\|} \; . \end{aligned} \tag{6.15}$$

Dans cette expression, nous avons défini

$$\begin{aligned} f_1 &= \Lambda^{-2\varepsilon} K X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f \; , \\ f_2 &= \Lambda^{2\varepsilon} X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A f \; . \end{aligned}$$

On peut borner $\|f_1\|^2$ en écrivant

$$f_1 = \Lambda^{-2\varepsilon} X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A K f + \Lambda^{-2\varepsilon}[K, X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] f = X_{6,3} + X_{6,4} \; .$$

Le terme résultant de $X_{6,3}$ est borné en utilisant le Lemme 5.12. En ce qui concerne l'autre terme, on récrit le commutateur comme

$$[K, X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] = [K_1, X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] - \sum_i [r_i X^{F_i}, X^B \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] \; .$$

Le terme qui résulte du premier opérateur est borné en développant le commutateur et en utilisant le Lemme 5.12. Celui qui résulte du deuxième opérateur est borné en utilisant une démarche similaire que celle utilisée pour borner le terme $T_{5,3}$. On trouve ainsi que $\|f_1\| \leq C(\|Kf\| + \|f\|)$.

Pour borner $\|f_2\|^2$, on écrit

$$f_2 = \Lambda^{4\varepsilon-2} X^A \Lambda^{1-4\varepsilon} \Lambda^{4\varepsilon-1} X^B f + \Lambda^{2\varepsilon}[X^B, \Lambda^{2\varepsilon-2} X^A] f \; .$$

Le premier terme est borné en utilisant l'hypothèse de récurrence et le Lemme 5.12. C'est le seul endroit où nous avons eu besoin d'utiliser que $\|\Lambda^{4\varepsilon-1} X^B f\|^2 \leq C(\|Kf\| + \|f\|)^2$. Tous les autres termes que nous avons rencontrés jusqu'à maintenant auraient pu être bornés en utilisant seulement $\|\Lambda^{2\varepsilon-1} X^B f\| \leq C(\|Kf\| + \|f\|)^2$. Le deuxième terme se borne de nouveau de manière similaire, en développant le commutateur et en utilisant le Lemme 5.12. On a donc bien $T_{6,1} \leq C(\|Kf\| + \|f\|)^2$.

Afin d'achever la démonstration, il faut encore montrer que (5.10) est valide avec $i = 0$. On utilise pour ceci la relation

$$[R_i, K_0] = X^{F_i} + (2a_i/\lambda_i^2) R_i^* + b_i\{F_i, H_L\} + b_i \sum_j r_j \{F_i, F_j\} \; .$$

La démonstration se fait ensuite exactement de la même manière en posant $\varepsilon = 1/4$ et en remplaçant X^A par X^{F_i} et X^B par R_i ou R_i^*. La démonstration est un peu plus simple du fait que plusieurs commutateurs s'annulent. En particulier, il n'y a pas d'équivalent au terme T_2.

7 Conclusion

Ce travail se voulait plus une extension des résultats de [EPR, R-B] qu'autre chose. En tant que tel, il ne contient donc pas des idées de démonstration fondamentalement nouvelles. Néanmoins, les résultats de la Section 5 constituent à mon avis un petit pas vers l'abstraction des techniques de [EPR, R-B].

Dans la version actuelle du travail, il semble que les hypothèses que nous faisons sur l'Hamiltonien du système soient un peu trop restrictives. En effet, on s'attend intuitivement à ce que des résultats similaires à ceux que nous avons démontrés puissent être trouvés lorsque les champs de vecteurs X^A n'engendrent tout l'espace tangent de $\tilde{\mathcal{M}}$ que presque partout. La difficulté est qu'alors la Proposition 5.5 n'est plus vraie. Il faut donc trouver un moyen de contourner ceci. Il est possible que l'on puisse faire ceci en ajoutant à l'Hamiltonien libre un terme artificiel qui diverge sur les zones "critiques".

A Opérateurs de Schrödinger à résolvante compacte

Dans cet appendice, nous allons donner un critère assez fin sur le potentiel d'un opérateur de Schrödinger qui assure que celui-ci ne possède pas de spectre essentiel.

A.1 Quelques résultats connus

Dans cette partie, nous allons donner quelques résultats que nous utiliserons par la suite.

Lemme A.1 *Soit I un intervalle et $u : I \to \mathbb{R}$ une fois continûment différentiable et s'annulant au moins une fois dans I. Alors, on a l'estimation*

$$\pi\|u\| \leq 2|I|\,\|u'\| \,.$$

La démonstration de ce lemme peut se trouver dans [SM, p. 78].

Lemme A.2 *Soit $H = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2 + V$ un opérateur Hamiltonien en n dimensions. Supposons qu'il existe un compact K et une constante λ_0 tels que l'on ait*

$$\langle Hu, u\rangle_{\bar{K}} \geq \lambda_0\|u\|^2_{\bar{K}} \,,$$

pour tout $u \in D(H)$. Alors $\sigma_e(H) \subset [\lambda_0, \infty)$.

Dans cet énoncé, $\sigma_e(H)$ désigne le spectre essentiel de H. La démonstration de ce lemme peut se trouver dans la plupart des livres d'analyse d'opérateurs.

A.2 Résultats

Lemme A.3 *Soient $I_1, \ldots, I_n$ des intervalles, $B = I_1 \times \ldots \times I_n$ et $u : B \to \mathbb{R}$ continue. Alors, la fonction $u_1 : B \to \mathbb{R}$ définie par $u_1^2(x) = \min_{y_1 \in I_1} u^2(y_1, x_2, \ldots, x_n)$ et $\operatorname{sgn} u_1(x) = \operatorname{sgn} u(x)$ (si $u_1(x) \neq 0$) est également continue.*

Remarque. u_1 est bien définie. En effet, si, pour un x donné, $u(x) > 0$ et $u_1^2(x) \neq 0$, alors $u(y) > 0$ pour tout y de la forme $(y_1, x_2, \ldots, x_n)$. Si ce n'était pas le cas, on aurait en effet un y de cette forme tel que $u(y) = 0$, ce qui impliquerait que $u_1^2(x) = 0$.

Démonstration. On sait que u_1^2 est une fonction continue du fait que u^2 est continue et que, si $\{f_\alpha\}_{\alpha \in A}$ est une famille de fonctions continues, alors $f(x) = \inf_{\alpha \in A} f_\alpha(x)$ est également une fonction continue. Prenons alors $x \in B$. On a trois cas

- Si $u(x) > 0$, il existe un voisinage V de x tel que $u(x)$ est positive. Sur V, on a alors $u_1(x) = \sqrt{u_1^2(x)}$. Donc u_1 est continue sur V.
- Si $u(x) < 0$, il existe alors un voisinage V de x tel que $u(x)$ est négative. Sur V, on a alors $u_1(x) = -\sqrt{u_1^2(x)}$. Donc u_1 est continue sur V.
- Si $u(x) = 0$, on se fixe $\varepsilon > 0$. Il existe alors un voisinage V de x tel que $|u_1^2(x)| < \varepsilon^2$ sur V. On a donc $|u_1(x)| < \varepsilon$ sur V.

Ceci démontre le lemme. □

Lemme A.4 *Soient $I_1, \ldots, I_n$ des intervalles et soit $B = I_1 \times \ldots \times I_n$. Soit $V : B \to \mathbb{R}_+$ continue par morceaux et $u : B \to \mathbb{C}$ une fois continûment différentiable. Soit de plus*

$$\nu_j = \inf_{x \in B} |I_j|^{-1} \int_{I_j} V(x_1, \ldots, x_{j-1}, t, x_{j+1}, \ldots, x_n)\, dt\ .$$

Alors, pour tout $j \in \{1 \ldots n\}$ et pour tout $b \geq 0$, on a

$$\frac{\nu_j b}{\nu_j + b} \|u\|^2 \leq \langle Vu, u \rangle + b k_0^2 |I_j|^2 \|\partial_j u\|^2\ , \tag{A.1}$$

avec $k_0 = 2/\pi$.

Démonstration. Sans perte de généralité, on fait la démonstration pour $j = 1$. On peut aussi supposer que $b > 0$ car le cas $b = 0$ est trivial. On pose alors

$$\varrho^2(x) = V(x) \quad \text{et} \quad u_1^2(x) = \min_{y_1 \in I_1} u^2(y_1, x_2, \ldots, x_n)\ .$$

On choisit de plus le signe de u_1 comme au Lemme A.3. Cette fonction est donc continue. De plus, $u_1(x)$ ne dépend pas de x_1.

On a ainsi l'estimation suivante :

$$\begin{aligned} \|\varrho u\|^2 &= \int_B V(x)|u(x)|^2 d^n x \geq \int_B V(x)|u_1(x)|^2 d^n x \\ &= \int_{I_n} \cdots \int_{I_2} |u_1(x)|^2 \int_{I_1} V(x)\, dx_1 \ldots dx_n \\ &\geq |I_1|\nu_1 \int_{I_n} \cdots \int_{I_2} |u_1(x)|^2\, dx_2 \ldots dx_n = \nu_1 \|u_1\|^2\ . \end{aligned} \tag{A.2}$$

Par le Lemme A.1, on a de plus l'estimation

$$\|u - u_1\| \leq k_0 |I_1|\, \|\partial_1 u\|\ .$$

Si on combine ces deux estimations, on obtient

$$\|u\| \leq k_0 |I_1|\, \|\partial_1 u\| + \|u_1\| \leq k_0 |I_1|\, \|\partial_1 u\| + \|\varrho u\|/\sqrt{\nu_1}\ .$$

On a donc pour tout $\alpha > 0$ l'estimation

$$\|u\|^2 \leq (1 + \alpha^{-1}) k_0^2 |I_1|^2 \|\partial_1 u\|^2 + \frac{1+\alpha}{\nu_1} \|\varrho u\|^2\ ,$$

et donc

$$\frac{\nu_1}{1+\alpha} \|u\|^2 \leq \frac{\nu_1}{\alpha} k_0^2 |I_1|^2 \|\partial_1 u\|^2 + \|\varrho u\|^2\ .$$

Il suffit alors de poser $\alpha = \nu_1/b$ pour obtenir le résultat cherché. $\square$

Corollaire A.5 *Si on pose $\nu = \max_{j=1,\dots,n} \nu_j$ et $|I| = \max_{j=1,\dots,n} |I_j|$, on a*

$$\frac{\nu b}{\nu + b}\|u\|^2 \le \langle Vu, u\rangle + bk_0^2 |I|^2 \sum_{j=1}^{n} \|\partial_j u\|^2 . \tag{A.3}$$

Avant de continuer, nous allons définir quelques grandeurs qui seront utiles par la suite.

Définition A.6

$$B_x^t = [x_1 - t/2, x_1 + t/2] \times \ldots \times [x_n - t/2, x_n + t/2] .$$

$$\nu_j^t(x) = \inf_{y \in B_x^t} t^{-1} \int_{-t/2}^{t/2} V(y_1, \ldots, y_{j-1}, s + x_j, y_{j+1}, \ldots, y_n)\, ds . \tag{A.4}$$

$$\nu^t = \liminf_{|x|\to\infty} \max_{j \in \{1,\ldots,n\}} \nu_j^t(x) .$$

Théorème A.7 *Si $H = -\frac{1}{2}\vec{\nabla}^2 + V$, on a pour tout $t > 0$ l'estimation*

$$\sigma_e(H) \subset \left[\frac{\pi^2 \nu^t}{8t^2\nu^t + \pi^2}, \infty\right) .$$

Démonstration. On se fixe une valeur $\varepsilon > 0$. Soit M assez grand pour que l'on ait

$$\max_{j\in\{1,\ldots,n\}} \nu_j^t(x) > \nu^t - \varepsilon ,$$

pour tout $|x| > M$.

Si l'on pose $b = \pi^2/(8t^2)$, on observe que la partie de droite de (A.3) n'est rien d'autre que $\langle Hu, u\rangle_B$. Si on prend $|x| > M$, on peut alors appliquer le Corollaire A.5 avec $B = B_x^t$ et $\nu_j = \nu_j^t(x)$. Ceci nous donne l'estimation

$$\langle Hu, u\rangle_{B_x^t} \ge \frac{\nu_j^t(x)\, b}{\nu_j^t(x) + b}\|u\|_{B_x^t}^2 ,$$

et donc (car $f(x) = xb/(x+b)$ est une fonction croissante)

$$\langle Hu, u\rangle_{B_x^t} \ge \frac{(\nu^t - \varepsilon)\, b}{\nu^t - \varepsilon + b}\|u\|_{B_x^t}^2 . \tag{A.5}$$

On peut alors paver l'espace par des hypercubes de côté t et on définit K comme la réunion de tous les cubes dont le centre est à moins de M de l'origine. On a alors, en sommant l'estimation (A.5) pour chaque cube qui n'est pas dans K, l'inégalité

$$\langle Hu, u\rangle_{\bar{K}} \ge \frac{(\nu^t - \varepsilon)\, b}{\nu^t - \varepsilon + b}\|u\|_{\bar{K}}^2 ,$$

où $\bar{K}$ désigne le complémentaire de K. Par le Lemme A.2, on sait alors que

$$\sigma_e(H) \subset \left[\frac{(\nu^t - \varepsilon)\, b}{\nu^t - \varepsilon + b}, \infty\right) .$$

Comme cette estimation est vraie pour n'importe quelle valeur $\varepsilon > 0$, on a le résultat cherché. $\square$

Références

[A] V.I. Arnold *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, 2nd edition, New York, Springer (1989)

[Ch] I. Chavel, *Eigenvalues in Riemannian Geometry*, New York, Academic Press (1984)

[EPR] J.-P. Eckmann, C.-A. Pillet et L. Rey-Bellet *Non-equilibrum Statistical Mechanics of Anharmonic Chains Coupled to Two Heat Baths at Different Temperatures*, Preprint, Genève (1998)

[EPR2] J.-P. Eckmann, C.-A. Pillet et L. Rey-Bellet *Entropy Production in Non-Linear, Thermally Driven Hamiltonian Systems*, Preprint (1998)

[Hö1] L. Hörmander *Hypoelliptic Second Order Differential Operators*, Acta Math. **119**, 147 (1967)

[Hö2] L. Hörmander *The Analysis of Linear Partial Differential Operators I-IV*, Berlin, Springer (1985)

[Ne] E. Nelson *Dynamical theories of Brownian Motion*, Princeton, Princeton University Press (1980)

[R-B] L. Rey-Bellet *Markov Processes And Non-Equilibrum Statistical Mechanics*, travail de thèse, Université de Genève (1998)

[RS] M. Reed et B. Simon *Methods of Modern Mathematical Physics I-IV*, Boston, Academic Press (1978)

[SM] M. Schechter *Operator Methods in Quantum Mechanics*, New York, North Holland (1981)

[SZ] Z. Schuss *Theory and Applications of Stochastic Differential Equations*, New York, Wiley & Sons (1980)

[Yo] K. Yosida *Functional Analysis* 2nd Edition, Berlin, Springer (1968)