Exposé de M1: Algorithme de Metropolis

Erwan Scornet

27 juin 2011

Introduction

Le but de cet exposé est de présenter la méthode de Monte Carlo et plus particulièrement l'algorithme de Metropolis qu'on se propose d'appliquer à diverses situations. Cet algorithme permet de simuler n'importe quelle mesure de probabilité avec des applications notamment en thermodynamique (énergie de Gibbs), en physique numérique (calculs d'intégrales, calcul d'extrema), mais également en finance. Cette simulation est utilisée lorsque les calculs déterministes (i.e. par des méthodes conventionnels) sont beaucoup trop longs. La totalité de cet exposé provient de l'article [GL10].

On se propose dans cet exposé de décrire la méthode permettant de simuler une mesure sur une variété riemanienne sans bord.

Table des matières

On se pose le problème suivant : étant donné une fonction $f : [0,1] \to \mathbb{R}$ comment peut-on calculer $\int_0^1 f(x)dx$?

D'après la loi forte des grands nombres, on sait que si $\mathbb{X}_1, ..., \mathbb{X}_n$ sont des v.a. indépendantes uniformément distribuées sur $[0,1]$, alors

$$\frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f(\mathbb{X}_k) \to \mathbb{E}\left(f(\mathbb{X}_1)\right) = \int_0^1 f(x)dx$$

et une estimation de la vitesse de convergence est fourni par le Théorème Central Limite. La vitesse est au plus en $n^{-\frac{1}{2}}$

Remarque Cette estimation est bonne car il est facile de simuler des variables aléatoires uniformes sur $[0,1]$ et cette estimation ne dépend pas de la dimension d'espace : elle est aussi efficace sur $[0,1]^d$.

Soit π une mesure de probabilité sur $[0,1]$. On peut calculer de la même manière

$$\int_0^1 f(x)d\pi(x)$$

Cependant, il faudrait pouvoir simuler des variables aléatoires de loi π ce qui n'est pas évident a priori. C'est dans ce but qu'on va utiliser les chaines de Markov.

1 Simulation de mesure et calculs d'intégrales sur un espace d'état dénombrable

Soit Ω un espace d'état dénombrable. Considérons une chaine de Markov (CM) sur Ω, totalement définie par sa fonction de transition $k(x, y)$. Cette chaîne de Markov, sous réserve de posséder quelques bonnes propriétés, possède une mesure invariante ρ ($\rho(x)$ pour $x \in \Omega$ correspond à la probabilité qu'une personne partant de n'importe quel $y \in \Omega$ arrive en x au bout d'un temps très long). Cependant, on voudrait simuler la mesure π. L'idée est de réussir à modifier k pour que π soit la mesure invariante de la nouvelle chaine de Markov . Ainsi si on fait évoluer une variable aléatoire sur Ω grâce à la chaine de Markov modifiée, on obtiendra une variable aléatoire limite dont la loi est π.

Définition : Algorithme de Metropolis
L'algorithme de Metropolis est la modification de la fonction de transition (FT) afin d'obtenir une chaine de Markov de loi invariante π.

Position du problème
On aimerait, à partir d'une matrice de transition $K(x, y)$, fabriquer une matrice $M(x, y)$ telle que la CM de matrice de transition $M(x, y)$ admette π pour loi stationnaire. On doit néanmoins avoir des conditions sur $K(x, y)$:
- K est apériodique
- K est irréductible

Pour ceci, définissons le *taux d'acceptation* $A(x, y)$ par :

$$A(x, y) = \frac{\pi(y)K(y, x)}{\pi(x)K(x, y)}$$

Remarque 1 Si $\forall x, y, A(x, y) = 1$, la CM de loi initiale π et de fonction de transition K est réversible. Ainsi, sa loi converge vers la mesure π

Remarque 2 Si $A(x, y) > 1$ alors $\mathbb{P}(\mathbb{X}_i = y \text{ et } \mathbb{X}_{i+1} = x) > \mathbb{P}(X_i = x, X_{i+1} = y)$. En d'autres termes, le voyage se fait plus facilement de y vers x que de x vers y. Pour avoir une mesure réversible, et donc stationnaire, il convient de rééquilibrer les voyages, i.e. de favoriser le passage de x vers y.

On pose alors $M(x, y)$ la nouvelle fonction de transition définie par, si $x \neq y$,

$$M(x, y) = \begin{cases} K(x, y) & \text{si } A(x, y) \geq 1 \\ K(x, y)A(x, y) & \text{si } A(x, y) < 1 \end{cases}$$

On peut résumer ceci en

$$M(x, y) = K(x, y) \min(1, A(x, y)) \tag{1}$$

Interprétation

Supposons que la chaine soit en x.

- Si $A(x, y) \geq 1$, le voyage $y \to x$ est plus fréquent que celui de $x \to y$. On pose $M(x, y) = K(x, y)$. Autrement dit, on calibre la nouvelle FT sur la plus petite valeur, ici $K(x, y)$.
- En revanche, si $A(x, y) < 1$, le voyage $x \to y$ est plus fréquent que celui de $y \to x$. Pour compenser, on va :
  - en y avec une probabilité $A(x, y)K(x, y)$
  - en x (i.e. on reste sur place) avec une probabilité $1 - A(x, y)K(x, y)$

Lemme : mesure stationnaire

π est réversible pour M et est donc l'unique mesure stationnaire de la CM modifiée.

Preuve

Soit $x \neq y$. Soit $A(x, y) \geq 1$, soit $A(y, x) \geq 1$. Supposons, sans nuire à la généralité, que $A(x, y) \geq 1$. Alors,

$$\pi(y)M(y, x) = \pi(y)K(y, x)A(y, x)$$

Or, par définition, $\pi(y)K(y, x)A(y, x) = \pi(x)K(x, y)$ ce qui conclut.

La chaîne de FT $M(x, y)$ admet donc π pour loi stationnaire. On peut donc simuler π de la façon suivante : on prend une distribution quelconque sur l'espace Ω (éventuellement un dirac) et on laisse évoluer le système selon la FT $M(x, y)$. On obtient une variable aléatoire dont la loi limite est π.

Cette méthode permet effectivement le calcul d'intégrale de la forme $\int_\Omega f(x)d\pi(x)$. Le théorème suivant justifie la méthode de simulation précédente.

Théorème ergodique

Soit Ω un espace d'états fini ou dénombrable. Soit Q une fonction de transition irréductible et apériodique, on suppose que la CM de fonction de transition Q admet une probabilité invariante π. Alors,

1. π est l'unique probabilité invariante et $\pi(x) > 0$ pour tout $x \in \Omega$
2. Tous les états sont récurrents

3. $\forall x \in E, \forall f : \Omega \to \mathbb{R}$ telle que $\mathbb{E}_\pi(|f|) < +\infty$

$$\lim \frac{1}{n} \sum_{k=1}^{n} f(X_k^x) = \int_\Omega f(y) d\pi(y), \ p.s.$$

On a donc établi une méthode permettant de simuler la mesure π qui trouve son utilité notamment dans le calcul d'intégrale. Cependant pour que cette méthode soit efficace, il faudrait connaître la vitesse de convergence de cet algorithme. Dans le cas où Ω est fini, on a le résultat suivant sur la vitesse de convergence de l'algorithme :

Théorème : vitesse de convergence d'une CM sur un espace d'états fini
Soit $\Omega = \{1, ..., N\}$ et K une fonction de transition sur Ω, irréductible et apériodique. Alors Spec(K)$= \{1, \lambda_2, ..., \lambda_N\}$ avec $1 > |\lambda_2| \geq ... \geq |\lambda_N|$ et il existe des constantes C, A telles que, pour tout n, on ait

$$\sup_x ||K^n(x,y)dy - \pi||_{VT} \leq C|\lambda_2|^n n^A = Ce^{n \ln \lambda_2 + A \ln n} \tag{2}$$

Cependant, lorsque Ω est seulement dénombrable, ou si $\Omega = [0,1]$, on n'a pas de vitesse de convergence universelle. Ceci est dû aux valeurs propres de la FT : si Ω est infini, leur nombre est infini et on peut imaginer qu'il existe une suite de valeurs propres qui tende vers 1 de sorte que la convergence (mesurée dans le cas fini par la première valeur propre inférieure à 1) soit aussi lente qu'on le souhaite.

On va montrer que la vitesse de convergence de l'algorithme de Metropolis est exponentielle même pour des ensembles Ω infinis. On choisit de s'intéresser ici à l'algorithme de Metropolis sur une variété riemanienne.

2 Algorithme de Metropolis sur une variété Riemanienne

Soit $\Omega = (M, g)$ une variété riemanienne compact, sans bord, régulière, de dimension d munie d'une métrique g.

2.1 Généralités

Notations
On note $d_g(x,y)$ la distance géodésique entre deux points de la variété x et y. Soit $B(x,h)$ la boule centrée en x de rayon h définie par :

$$B(x,h) = \{y, d_g(x,y) \leq h\}$$

On note $|B(x,h)|$ le volume de la boule $B(x,h)$ défini par

$$|B(x,h)| = \int_{B(x,h)} d_g y$$

La relation entre un opérateur T_h et son noyau K_h est donnée par :

$$(T_h f)(x) = \int_M f(y) K_h(x,y) d_g y$$

Opérateur associé à une marche aléatoire
L'opérateur T_h associé à une marche aléatoire de rayon h sur la variété M est

$$(T_h f)(x) = \frac{1}{|B(x,h)|} \int_{B(x,h)} f(y) d_g y$$

Le noyau associé à cet opérateur est, par définition,

$$K_h(x,y) = \frac{\mathbb{1}_{\{d_g(x,y) \leq h\}}}{|B(x,h)|}$$

L'opérateur T_h agit sur les fonctions $f : M \to \mathbb{R}$. En premier approche, on peut faire évoluer des mesures de probabilités de manière simple grâce à T_h. Par exemple, pour $f = \delta_x$ qui correspond au cas où la marche aléatoire commence au point x, on a

$$\begin{aligned} (T_h f)(y) &= \frac{1}{|B(y,h)|} \int_{B(y,h)} \delta_x(z) d_g z \\ &= \left\{ \begin{array}{cl} 0 & \text{si } y \notin B(x,h) \\ \frac{1}{|B(y,h)|} & \text{si } y \in B(x,h) \end{array} \right. \end{aligned}$$

Le point x se retrouve après une itération uniformément distribué dans la boule de centre x et de rayon h. De manière plus rigoureuse, T_h agit sur l'espace des mesures de probabilités par transposition

$$<^t T_h(\mu), f> = < T_h(f), \mu >$$

où

$$< f, \mu > = \int_\Omega f(x) d\mu(x)$$

En itérant T_h, on simule ainsi une mesure, sous réserve que les itérées de T_h convergent et c'est ce qu'on va montrer dans la suite.

Mesure uniforme sur la variété

On voit que cet algorithme a de bonnes chances de simuler non pas une mesure quelconque mais la mesure uniforme $d\mu_M$ sur la variété définie par

$$d\mu_M = \frac{d_g x}{Vol(M)}$$

Dans ce qui suit, on va montrer que les itérées de T_h permettent de simuler une mesure proche de la mesure uniforme.

Théorème : mesure invariante pour T_h

L'opérateur T_h admet $d\nu_h(x) = \frac{|B(x,h)|}{Z_h c_d h^d} d_g x$ comme mesure invariante

Preuve

D'après ce qui précède, on sait que T_h agit par transposition sur l'ensemble des mesures, on a :

$$\begin{aligned}
<^t T_h(d\nu_h), f> &= < T_h(f), d\nu_h > \\
&= \int_{x \in M} T_h(f)(x) d\nu_h(x) \\
&= \int_{x \in M} \int_{y \in B(x,h)} \frac{1}{|B(x,h)|} f(y) d_g y \frac{|B(x,h)|}{Z_h c_d h^d} d_g x \\
&= \frac{1}{Z_h c_d h^d} \int_{x \in M} \int_{y \in B(x,h)} f(y) d_g y d_g x \\
&= \frac{1}{Z_h c_d h^d} \int_{y \in M} \int_{x \in B(y,h)} f(y) d_g y d_g x \\
&= \int_{y \in M} f(y) (\int_{x \in B(y,h)} \frac{1}{Z_h c_d h^d} d_g x) d_g y \\
&= \int_{y \in M} f(y) \frac{|B(y,h)|}{Z_h c_d h^d} \\
&= \int_{y \in M} f(y) d\nu_h y \\
&= < f, d\nu_h >
\end{aligned}$$

Donc $d\nu_h$ est une mesure invariante pour T_h.

Ce résultat n'est pas satisfaisant car même si on a que

$$d\nu_h \rightarrow_{h \rightarrow 0} d\mu$$

la mesure $d\nu_h$ dépend en général de la variété M. On a donc réussi à simuler pour tout h une mesure $d\nu_h$ qui est assez proche de le mesure uniforme. Cependant, étant donné que h est fixé au départ, cet algorithme ne permet pas de simuler la mesure uniforme car même après un très grand nombre d'étape, on n'aura approché que $d\nu_h$. Pour corriger ceci, on va modifier l'algorithme de manière à ce qu'il admette $d\mu$ comme mesure invariante.

Modification de T_h pour simuler une mesure uniforme

Revenons un instant au cas général, c'est-à-dire au cas où l'on souhaite simuler une mesure

$$d\pi(x) = \rho(x)d_gx.$$

D'après l'expression de $d\nu_h$, il est équivalent d'essayer de simuler

$$d\pi(x) = \tilde{\rho}(x)d\nu_h(x)$$

où $\tilde{\rho}(x)$ est donné par

$$\tilde{\rho}(x) = \rho(x)\frac{Z_h c_d h^d}{|B(x,h)|} \tag{3}$$

On définit alors, comme dans la partie précédente, un taux d'acceptation $A(x,y)$ donné par :

$$A(x,y) = \frac{\tilde{\rho}(y)}{\tilde{\rho}(x)}$$

D'après (3), on a

$$A(x,y) = \frac{\rho(y)}{\rho(x)}\frac{|B(x,h)|}{|B(y,h)|}. \tag{4}$$

On définit alors un nouvel opérateur M_h par son noyau $\mathcal{M}_h$:

$$\mathcal{M}_h(x,y) = m_h(x)\delta_{y=x} + K_h(x,y)\min(1, A(x,y))$$

où m_h est défini de manière à ce que $\int_M \mathcal{M}_h(x,y)d_gy = 1$ i.e.

$$m_h(x) = 1 - \int_M K_h(x,y)\min(1, A(x,y))$$

Lemme

Dans le cas général, la mesure $d\pi = \rho(x)d_gx$ est invariante pour l'opérateur M_h.

Démonstration

$$\begin{aligned}<^t M_h(\rho d_g x), f> &= \int_{x\in M} M_h(f)(x)\rho(x)d_g x \\ &= \int_{x\in M} m_h(x)f(x)\rho(x)d_g x \\ &+ \int_{x\in M}\int_{y\in B(x,h)} \frac{1}{|B(x,h)|}\min(A(x,y),1)f(y)d_g y\rho(x)d_g x\end{aligned}$$

Le premier terme vaut

$$\begin{aligned}&\int_{x\in M} m_h(x)f(x)\rho(x)d_g x \\ &= \int_{x\in M}(1-\int_{y\in M}\mathcal{K}_h(x,y)\min(A(x,y),1)d_g y)f(x)\rho(x)d_g x \\ &= \int_{x\in M}\rho(x)f(x)d_g x - \int_{x\in M}\int_{y\in B(x,h)}\frac{\rho(x)}{|B(x,h)|}\min(A(x,y),1)f(x)d_g x d_g y \\ &= \int_{x\in M}\rho(x)f(x)d_g x - \int_{x\in M}\int_{y\in B(x,h)}\min(\frac{\rho(x)}{|B(x,h)|},\frac{\rho(y)}{|B(y,h)|})f(x)d_g x d_g y\end{aligned}$$

Le deuxième vaut

$$\int_{x\in M}\int_{y\in M}\min(\frac{\rho(x)}{|B(x,h)|},\frac{\rho(y)}{|B(y,h)|})f(y)d_g y d_g x$$

On a donc, finalement,

$$\begin{aligned}<^t M_h(\rho d_g x), f> &= \int_{x\in M}\rho(x)f(x)d_g x \\ &=<\rho d_g x, f>\end{aligned}$$

Donc $\rho d_g x$ est invariante pour M_h

Dans la suite, on essaye de simuler la mesure uniforme. On choisit donc $\rho(x) = 1$. On a donc

$$A(x,y) = \frac{|B(x,h)|}{|B(y,h)|} \tag{5}$$

Pour réussir à montrer la convergence et la vitesse de convergence de cet algorithme vers la mesure uniforme $d\mu$, il convient d'analyser l'opérateur M_h.

2.2 Analyse de l'opérateur de marche aléatoire T

2.2.1 Premier théorème fondamental

Notations préliminaires

Soit $|\Delta_h|$ l'opérateur positif, borné, autoadjoint sur $L^2(M, d\nu_h)$ défini par

$$1 - T_h = \frac{h^2}{2(d+2)}|\Delta_h|$$

Premier théorème fondamental

Il existe h_0 assez petit, $\gamma < 1$, $C_1 > 0$ tels que $\forall 0 < h < h_0$,

- $\mathrm{Spec}(T_h) \subset [-\gamma, 1]$
- 1 est valeur propre simple de T_h

Soit

$$0 < ... \leq \mu_{k+1}(h) \leq \mu_k(h) \leq ... \leq \mu_1(h) < \mu_0(h) = 1$$

les valeurs propres positives de T_h.

Pour tout $L > 0, \exists C_2 > 0, \forall 0 < h < h_0, \forall k \leq L$, on a

$$|\frac{1-\mu_k(h)}{h^2} - \frac{\lambda_k}{2(d+2)}| \leq C_2 h^2 \tag{6}$$

où les λ_k sont les valeurs propres de $-\Delta_g$.

Soit $N(a, h)$ le nombre de valeur propre de T_h dans l'intervalle $[a, 1]$. On a l'estimée de Weyl suivante sur $N(1 - \tau h^2, h)$:

$$\forall \delta \in]0,1[, \forall \tau \in [0, (1-\delta)h^{-2}]$$

$$|N(1-\tau h^2, h) - (2\pi h)^{-d} \int_{\Gamma_d(|\xi|_x^2) \in [1-\tau h^2, 1]} dx d\xi| \leq C_{\delta,1}(1+\tau)^{(d-1)/2} \tag{7}$$

où $dxd\xi$ est la forme volume sur le fibré tangent associé à la variété M et où $|\xi|_x$ est la longueur relative à d_g du vecteur tangent ξ au point x.

En particulier, on a

$$N(1-\tau h^2, h) \leq C_\delta (1+\tau)^{d/2} \tag{8}$$

De plus, on a que pour toute fonction propre e_k^h de T_h associée à la valeur propre $\mu_k(h) \in [\delta, 1]$,

$$||e_k^h||_{L^\infty} \leq C_\delta (1 + \tau_k(h))^{d/4} ||e_k^h||_{L^2} \tag{9}$$

avec $\tau_k(h) = h^{-2}(1 - \mu_k(h))$.

Remarque En fait, ce théorème montre que l'opérateur $|\Delta_h|$, qui est juste une renormalisation de T_h, est proche du Laplacien au sens L^2. En effet, (6) montre que les valeurs propres de $|\Delta_h|$ sont distantes de moins de h^2 de celles du Laplacien. L'opérateur $|\Delta_h|$ n'est donc qu'une perturbation, au sens L^2 du Laplacien.

2.2.2 Calcul microlocal : notations et définition

Ceci nous pousse à étudier d'un peu plus près le Laplacien. En effet, sur un ouvert de R^n, les fonctions invariantes par T_h sont des fonctions qui vérifie $\Delta f = 0$. Il est donc naturel que le Laplacien, même sur une variété riemanienne, ait toujours un rôle à jouer.

Lien avec le Laplacien

On note Δ_g l'opérateur (négatif) de Laplace-Beltrami sur (M, g) et

$$0 = \lambda_0 < \lambda_1 \leq ... \leq \lambda_n \leq ...$$

le spectre de l'opérateur auto-adjoint $-\Delta_g$ sur $L^2(M, d_g x)$. Posons

$$G_d(\xi) = \frac{1}{c_d} \int_{|y| \leq 1} e^{iy\xi} dy$$

Remarquons que G_d apparaît naturellement car c'est la transformée de Fourier de la boule unité

$$G_d(\xi) = \frac{1}{c_d} \mathcal{F}(\mathbb{1}_{B(0,1)})$$

Ainsi, G_d ne dépend que de $|\xi|^2$. Posons

$$G_d(\xi) = \Gamma_d(|\xi|^2)$$

qui vérifie les propriétés suivantes (admises) :
- Γ_d est définie sur $[0, \infty[$ et est analytique réelle
- $|\Gamma_d(s)| \leq 1$
- $\lim_{s \to +\infty} \Gamma_d(s) = 0$
- $\Gamma_d(s) = 1 - \frac{s}{2(d+2)} + O(s^2)$
- $\exists \gamma_0 < 1, \forall s, \Gamma_d(s) \in [-\gamma_0, 1]$, avec $\Gamma_d(s) = 1$ ssi $s = 0$ ()

Espace H^s

On dispose d'une base orthonormée dans L^2 composée des fonctions propres réelles du Laplacien donnes par

$$-\Delta_g e_j = \lambda_j e_j$$

Pour toute distribution $f \in \mathcal{D}'$, on peut écrire

$$f = \sum_j f_j e_j(x)$$

où les f_j sont les coefficients de Fourier de f donnés par

$$f_j = \int f(x) e_j(x) d_g x$$

On définit, de même que dans $\mathbb{R}^n$ les espaces de Sobolev

$$H^s(M) = (1 - \Delta_g)^{-s/2} L^2(M, d_g x)$$

On rappelle que $f \in H^s(M)$ ssi

$$||f||^2_{H^s(M)} = \sum_j (1 + \lambda_j)^s |f_j|^2 < \infty$$

On définit la h norme de Sobolev par

$$||f||^2_{h,s} = \sum_j (1 + h^2 \lambda_j)^s |f_j|^2 \tag{10}$$

Opérateur à partir de fonction

Dans la suite, étant donné une fonction $\phi \in C_0^\infty([0, \infty[)$, on considèrera souvent l'opérateur $\phi(-h^2\Delta_g)$ défini à partir de ϕ par la formule

$$\phi(-h^2\Delta_g)(f) = \sum_j \phi(h^2\lambda_j) f_j e_j(x)$$

En particulier, on considèrera souvent $\Gamma_{d,h} = \Gamma_d(-h^2\Delta_g)$.

On doit maintenant définir plusieurs classes de fonctions. Commençons par la classe S^m des fonctions de (x, ξ, h) régulières en x, ξ et dont les dérivées par rapport à ξ d'ordre supérieur à m tendent vers 0 à l'infini.

Définition : S^m

On dit que $a(x, \xi, h) \in S^m$ pour $m \in \mathbb{R}$ si

- a est régulière en $(x, \xi) \in \mathbb{R}^{2d}$ pour $h \in]0, 1]$
- $\forall \alpha, \beta, \exists C_{\alpha,\beta}$ indépendant de $h, \forall (x, \xi) \in \mathbb{R}^{2d}$,

$$|\partial_x^\alpha \partial_\xi^\beta a(x, \xi, h)| \leq C_{\alpha,\beta} (1 + |\xi|)^{m - |\beta|}$$

Définition : Opérateur associé à $a \in S^m$

Pour $a \in S^m$, $Op(a)$ est un opérateur agissant sur S^m défini par

$$\begin{aligned} Op(a)(f)(x) &= (2\pi h)^{-d} \int e^{i(x-y)\xi/h} a(x,\xi,h) f(y) dy d\xi \\ &= F^{-1}\Big(a(x, h\nu, h)\hat{f}(\nu)\Big) \end{aligned}$$

Définition S^m_{cl}

On dit que $a(x,\xi,h) \in S^m_{cl}$ (avec $S^m_{cl} \subset S^m$) s'il existe une suite $a_n(x,\xi) \in S^{m-n}, n \geq 0$ telle que pour tout N, on a

$$a(x,\xi,h) = \sum_{0 \leq n < N} (\frac{h}{i})^n a_n(x,\xi) + h^N r_N(x, \xi h), \quad \text{avec } r_N \in S^{m-N}$$

Autrement dit, si $a \in S^m_{cl}$, on peut développer a en série entière par rapport à h à tout ordre et obtenir un reste aussi régulier que l'on veut si l'on accepte d'avoir beaucoup de termes dans la série entière.

Définition : classe des opérateurs classiques pseudo-différentiels d'ordre m ε^m_{cl}

Une famille d'opérateurs A_h agissant sur l'espace des distributions $\mathcal{D}'(M)$ appartient à ε^m_{cl} ssi $\forall x_0 \in M$,

- $\exists U_{x_0}$ contenant x_0
- $\exists \varphi \in C^\infty_0$ valant 1 au voisinage de 0
- $\exists \psi \in C^\infty_0$ valant 1 au voisinage du support de φ

tels que

- $A_h \varphi = \psi A_h \varphi + R_h,$ avec R_h régulière
- $\exists a \in S^m_{cl}$ tel que

$$\psi A_h \varphi = Op(a) \text{ sur } U$$

Autrement dit, $A_h \in \varepsilon^m_{cl}$ si la dépendance en h de A_h peut se comprendre comme celle d'un opérateur $Op(a)$ localement en x (i.e. si A_h est un opérateur localement analytique en h).

Définition : symbole principal

Si $A_h \in \varepsilon^m_{cl}$, le symbole principal de A_h, $\sigma_0(A_h)$, est par définition le premier terme dans le développement limité de A_h en h,

$$\sigma_0(A_h)(x,\xi) = a_0(x,\xi) \text{ avec } A_h = \sum_{n \geq 0} (h/i)^n a_n(x,\xi)$$

Définition : ε_{cl} et $\varepsilon_{cl}^{-\infty}$

On définit l'ensemble des opérateurs classiques pseudo-différentiels ε_{cl} par

$$\varepsilon_{cl} = \cup_m \varepsilon_{cl}^m$$

On définit l'ensemble des opérateurs classiques pseudo différentiels d'ordre $-\infty$, noté $\varepsilon_{cl}^{-\infty}$

$$\varepsilon_{cl}^{-\infty} = \cap_m \varepsilon_{cl}^m$$

Définition : $\tilde{\varepsilon}_{cl}^0$

Une famille d'opérateurs C_h agissant sur l'espace des distributions $\mathcal{D}'(M)$ appartient à $\tilde{\varepsilon}_{cl}^0$ ssi

- C_h est uniformément borné en h sur L^2
- $\forall \phi_0 \in C_0^\infty([0, \infty[)$, on a

$$\left. \begin{array}{l} \phi_0(-h^2\Delta_g)C_h \\ C_h\phi_0(-h^2\Delta_g) \end{array} \right\} \in \varepsilon_{cl}^{-\infty}$$

Autrement dit, $C_h \in \tilde{\varepsilon}_{cl}^0$ si C_h est borné en h et se comporte bien avec le Laplacien, au sens où le produit $C_h\Delta_g$ peut être compris, localement, comme un opérateur d'ordre infini. Deux autres points nous seront utiles dans la suite : une inégalité et le théorème du min-max.

Inégalité de Garding

Soit $a(x, \xi, h) \in S^m$ de partie principale a_m tel qu'il existe C, $\forall h \in]0, h_0[$, on ait

$$Re a_m(x, \xi) \geq C|\xi|^m$$

Alors, $\forall \varepsilon > 0, \forall f \in S(\mathbb{R}^n)$,

$$Re < Op(a)f, f > \geq (C - \varepsilon)||f||_{L^2}^2$$

Théorème du min-max

Soit A un opérateur compact, hermitien, sur un espace de Hilbert H. Soit

$$... \leq \lambda_n \leq ... \leq \lambda_1$$

les valeurs propres positives de A. On a alors, pour tout espace S_k de dimension k,

$$\inf_{x \in S_k, ||x||=1} < Ax, x > \leq \lambda_k$$

2.2.3 Lemmes préparatoires

Dans cette partie, on énonce une suite de lemme dont on trouvera la démonstration dans [GL10].

Lemme 1
T_h est uniformément borné en h sur C^2

On avait prédit le fait que T_h ait un lien avec le Laplacien. Plus précisément :

Lemme 2
Il existe h_0 tel que $\forall h < h_0$, l'opérateur $T_h \in \tilde{\varepsilon}^0_{cl}$.

De plus, on peut quantifier la différence entre T_h et $\Gamma_{d,h} = \Gamma_d(-h^2\Delta_g)$ de la manière suivante : elle est d'ordre h^2, régulière et est complexe.

Lemme 3
Soit $\phi_0 \in C_0^\infty([0,\infty[)$ et

$$A_h = h^{-2}(T_h - \Gamma_{d,h})\phi_0(-h^2\Delta_g)$$

Alors $A_h \in \varepsilon_{cl}^{-\infty}$. Son symbole principal $\sigma_0(A_h)$ vérifie près de $\xi = 0$,

$$\sigma_0(A_h)(x,\xi) = \left(\frac{S(x)}{3}|\xi|_x^2(\Gamma_d''(0) - \Gamma_d'(0)^2) + \frac{\Gamma_d''(0)}{3}Ric(x)(\xi,\xi)\right)\phi_0(|\xi|_x^2) + O(\xi^3)$$

où $Ric(x)$ et $S(x)$ sont respectivement le tenseur de Ricci et la courbure scalaire en x.

Lemme 3 bis

$$|B(0,h)| = h^d c_d(1 + \frac{\Gamma_d'(0)}{3}Sh^2 + O(h^3))$$

L'analyse de T_h est surtout compliqué lorsqu'on est proche de 0 (au sens des valeurs propres pour le laplacien). Lorsqu'on est loin de 0, T_h se comporte bien et est en particulier borné :

Lemme 4 : Action de T_h loin de 0, contrôle des hautes fréquences

Soit $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R})$ valant 1 près de 0. Il existe $h_0, C_0 > 0$ tel que

$$\forall p \in [1, \infty[, \forall h \in]0, h_0]$$
$$||T_h(1-\chi)(-\frac{h^2\Delta_g}{s})||_{L^p} \leq \frac{C_0}{\sqrt{s}}$$

pour tout $s \geq 1$.

De plus, lorsque h tend vers 0 les fonctions propres de T_h se comporte bien, i.e. leur h-norme est borné uniformément en h.

Lemme 5 : Contrôle de la norme des fonctions propres de T_h uniformément en h

$\exists h_0 > 0, \forall j \in \mathbb{N}, \exists C_j > 0$ tel que

$$\sup_{h \in]0, h_0]} ||e^h||_{h,j} \leq C_j$$

où $||f||_{h,j}$ est la h-norme de Sobolev définie par (10).

D'autre part, les fonctions propres de T_h, lorsqu'elles sont privées de leur spectre "laplacien" proche de 0 (avec une échelle donnée par h^2) tendent vers 0 avec h de manière très régulières.

Lemme 6 : Contrôle des fonctions propres loin de 0

$$\chi(-h^2\Delta_g)e^h - e^h = O_{C^\infty}(h^\infty)$$

où $\chi \in C_0^\infty(\mathbb{R}_+)$ avec

$$\chi = 1 \text{ sur } [0, s_1]$$
$$\chi = 0 \text{ sur } [s_1 + 1, \infty[$$
$$s_1 \ / \ \forall s \geq s_1 - 1, |\Gamma(s)| \leq \delta/2$$

En fait, on a mieux que le lemme 6 pour le contrôle de la norme des fonctions propres de T_h :

Lemme 7 : Contrôle de la norme des fonctions propres de T_h uniformément en h par des vraies normes de Sobolev

$$\forall j \in \mathbb{N}, \exists C_j, \forall h \in]0, h_0],$$
$$||e^h||_{H^j(M)} \leq C_j(1+\tau_h)^{j/2}$$

2.2.4 Preuve du théorème 1

Remarquons tout d'abord que T_h est autoadjoint (propriété trivialement vérifiée) et est compact comme tout opérateur à noyau.

Rappelons qu'il existe $\gamma < 1$ tel que $\Gamma_d(s) \in [-\gamma_0, 1]$ pour tout $s \in \mathbb{R}$ d'après (2.2.2). Soit $\varepsilon \in]0, \frac{1-\gamma_0}{2}[$ et $\chi(t) \in C_0^\infty([0, \infty[)$ valant 1 près de 0 et tel que $\chi(t) \in [0, 1]$ pour tout t. D'après le lemme 4, il existe $s > 0$ tel que

$$||T_h(1-\chi)(-\frac{h^2\Delta_g}{s})||_{L^2} \leq \varepsilon$$

D'autre part, d'après le lemme 3, on peut appliquer l'inégalité de Garding à l'opérateur $T_h\chi(-\frac{h^2\Delta_g}{s})$: pour $h > 0$ assez petit,

$$< T_h\chi(-\frac{h^2\Delta_g}{s})f, f >_{L^2} \geq (-\gamma_0 - \varepsilon)||f||_{L^2}^2$$

D'après les deux inégalités précédentes, on obtient :

$$< T_h f, f >_{L^2} \geq (-\gamma_0 - 2\varepsilon)||f||_{L^2}^2$$

Et donc, puisque T_h est autoadjoint dans L^2, on a que, pour tout ε,

$$\inf Spec(T_h) \ \geq (-\gamma_0 - 2\varepsilon)$$

Ce qui prouve que $\mathrm{Spec}(T_h) \subset [-\gamma_0, 1]$.

Preuve de (6)

Prouvons maintenant (6). Posons

$$|\Delta_h| = 2(d+2)\frac{1-T_h}{h^2} \tag{11}$$

Pour $k \leq L$, posons $m_k = \dim(\ker(\Delta_g + \lambda_k))$ la multiplicité de λ_k. Soit $\rho_0 \in C_0^\infty$ valant 1 près de 0. Alors il existe $h_0 > 0$ tel que pour $h \in]0, h_0]$, on a

$$e = \rho_0(-h^2\Delta_g)e$$

pour tout $e \in \ker(\Delta_g + \lambda_k)$ avec $k \leq L$. Soit (U_j) un recouvrement fini d'ouvert, et (ϕ_j) une partition de l'unité vérifiant

$$\begin{cases} \sum_j \phi_j = 1 \\ \phi_j \in C_0^\infty(U_j) \end{cases}$$

On a alors

$$(T_h - \Gamma_{d,h})e = \sum_j (T_h - \Gamma_{d,h})\rho_0(-h^2\Delta_g)\phi_j(e)$$

D'après le lemme 3, on a, pour tout j,

$$(T_h - \Gamma_{d,h})\rho_0(-h^2\Delta_g)\phi_j = h^2 Op(a) + R_h$$

avec

$$\begin{aligned} &a = a_2 + ha_3 + ... \in S_{cl}^{-\infty} \text{ à support compact dans } U_j \\ &R_h \text{ régulière} \\ &a_2(x,\xi) = O(\xi^2) \text{ près de } \xi = 0 \\ &a_3(x,0) = 0 \end{aligned}$$

Comme e est régulière et ne dépend pas de h, il vient que

$$\sum_j (T_h - \Gamma_{d,h})\rho_0(-h^2\Delta_g)\phi_j(e) \in O_{L^2}(h^4)$$

et donc

$$||(T_h - \Gamma_{d,h})e||_{L^2} = O(h^4) \tag{12}$$

D'autre part,

$$\begin{aligned} \Gamma_{d,h}e &= \Gamma_d(h^2\lambda_k)e \\ &= (1 + h^2\Gamma_d'(0)\lambda_k + O(h^4))e \end{aligned} \tag{13}$$

En combinant (12) et (13), on obtient

$$||(|\Delta_h| - \lambda_k)e||_{L^2} = O(h^2)$$

pour tout $e \in \ker(\Delta_g + \lambda_k)$. D'où, puisque $|\Delta_h|$ est autoadjoint, on a

$$\begin{aligned} &\exists C_0 > 0, \forall h \in]0, h_0], \forall 0 \leq k \leq L \\ &Card(Spec(|\Delta_h|) \cap [\lambda_k - C_0h^2, \lambda_k + C_0h^2]) \geq m_k \end{aligned} \tag{14}$$

Il reste donc à prouver l'inégalité inverse ce qui conclura. Soit maintenant e^h une fonction propre normalisée de $|\Delta_h|$. Elle vérifie donc

$$|\Delta_h|e^h = \tau_h e^h$$

avec τ_h borné. D'après le lemme 6 $e^h - \rho_0(-h^2\Delta_g)e^h \in O_{C^\infty}(h^\infty)$ et d'après le lemme 7, puisque τ_h est borné, $||e^h||_{H^j(M)} \leq C_j$ où les C_j sont indépendants de h. D'après le même argument qu'au dessus, il existe C indépendant de h tels que

$$||(\tau_h + \Delta_g)(e^h)||_{L^2} \leq Ch^2 \tag{15}$$

et donc dist$(\tau_h, Spec(-\Delta_g))\leq Ch^2$. Soit $p \geq m_k$ et soit $e_1(h), ..., e_p(h)$ une famille de fonctions propres orthonormée de $|\Delta_h$ associées aux valeurs propres $\tau_j(h) \in [\lambda_k - C_0h^2, \lambda_k + C_0h^2]$. D'après le lemme 7, il existe une suite (h_n) vérifiant

$$\begin{aligned} &h_n \to 0 \\ &e_l(h_n) \to_{H^2} f_l \end{aligned}$$

D'après (15), on obtient

$$\begin{gathered} -\Delta_g f_l = \lambda_k f_l, \ \forall 1 \leq l \leq p \\ \text{les fonctions } f_l \text{ sont orthogonales} \end{gathered}$$

Donc $m_k \geq p$ ce qui complète la preuve de (6). En particulier, ceci montre que 1 est valeur propre simple de T_h.

Preuve de (7)

Montrons maintenant l'estimée de Weyl (7). Soit $\delta \in]0,1[$. Soit $\tau \in [0,(1-\delta)h^{-2}]$. Remarquons que $N(1-\tau h^2, h)$ est le nombre de valeurs propres de $|\Delta_h|$ dans l'intervalle $[0, 2(d+2)\tau]$ d'après (11). Notons $N_0(a, h)$ le nombre de valeurs propres de $\Gamma_d(-h^2\Delta_g)$ dans l'intervalle $[a, 1]$. Définissons la fonction $\phi_h(s)$ et l'opérateur $|\Delta_h^0|$ par :

$$\begin{aligned} &\phi_h(s) = 2(d+2)\frac{1-\Gamma_d(s)}{h^2} \\ &|\Delta_h^0| = \phi_h(-h^2\Delta_g) \end{aligned} \tag{16}$$

Alors $N_0(1-\tau h^2, h)$ est le nombre de valeurs propres de $|\Delta_h^0|$ dans l'intervalle $[0, 2(d+2)\tau]$.

N_0 vérifie (7)

Montrons d'abord que N_0 vérifie l'estimée de Weyl (7), c'est-à-dire que $\exists C, \forall h \in]0, h_0[, \forall \tau \in [0, (1-\delta)h^{-2}]$,

$$|N_0(1-\tau h^2, h) - (2\pi h)^{-d} \int_{\Gamma_d(|\xi|_x^2) \in [1-\tau h^2, 1]} dx d\xi| \leq C_{\delta,1}(1+\tau)^{(d-1)/2} \tag{17}$$

Soit $n^+(\lambda)$ (resp. $n^-(\lambda)$) le nombre de valeurs propres λ_j de $-\Delta_g$ dans l'intervalle $[0, \lambda]$ (resp. $[0, \lambda[$). D'après l'estimée de Weyl classique avec reste, on a

$$n^{\pm}(\lambda) = (2\pi)^{-d} \int_{|\xi|_x^2 \leq \lambda} dx d\xi + O(\lambda^{(d-1)/2}) \tag{18}$$

D'après (16), $N_0(1-\tau h^2, h)$ est le nombre de valeurs propres λ_j de $-\Delta_g$ vérifiant $1 - \Gamma_d(h^2 \lambda_j) \leq \tau h^2$. En posant

$$H = \{s \geq 0, 1 - \Gamma_d(s) \leq \tau h^2\},$$

on obtient, comme $\tau \leq (1-\delta)h^{-2}$,

$$\begin{aligned}
&H = I_0 \cup ... \cup I_k \text{ réunion disjointe} \\
&I_0 = [0, s_0(\tau h^2)] \\
&I_k = [s_j^-(\tau h^2), s_j^+(\tau h^2)], \forall 1 \leq j \leq k \\
&0 < c_0 \leq s_1^- \leq s_1^+ < s_2^- \leq s_2^+ < ... \leq s_k^+ \leq c_1
\end{aligned}$$

où c_0 est indépendant de h, δ et c_1 est indépendant de h (on a pris c_0 tel que Γ_d soit décroissante sur $[0, c_0]$). On a donc

$$N_0(1-\tau h^2, h) = n^+(s_0 h^{-2}) + \sum_{j=1}^{k} n^+(s_j^+ h^{-2}) - n^-(s_j^- h^{-2}) \tag{19}$$

Remarquons que lorsque $\tau \leq ch^{-2}$ avec c assez petit, $k = 0$ et dans ce cas, on a, d'après (2.2.2)

$$s_0 h^{-2} \simeq 2(d+2)\tau$$

et alors (17) est une conséquence de (18). D'autre part, si $\tau \geq ch^{-2}$ alors

$$\left.\begin{array}{l} (s_j^{\pm} h^{-2})^{(d-1)/2} \\ (s_0 h^{-2})^{(d-1)/2} \end{array}\right\} \text{ sont de l'ordre de } \tau^{(d-1)/2}.$$

On obtient alors (17) à partir de (18) et (19).

Lien entre N_0 et N

On vient d'établir l'estimée de Weyl pour N_0. Il nous suffit donc de montrer que N_0 est assez proche de N pour que N vérifie la même estimée.

Soit E_τ l'espace vectoriel de dimension finie engendré par les fonctions propres e_j de $-\Delta_g$ avec $\phi_h(h^2\lambda_j) \leq 2\tau(d+2)$. D'après une conséquence de (16) déjà énoncée, on a

$$\dim E_\tau = N_0(1-\tau h^2, h)$$

D'après (2.2.3) et $|||\Delta_h|||_{L^2} \leq Ch^{-2}$, on a, pour tout $f \in L^2$,

$$| < |\Delta_h| f | f >_{L^2(M, Z_h d\nu_h)} - < |\Delta_h| f, f >_{L^2(M, d_g x)} | \leq C' ||f||^2_{L^2} \tag{20}$$

Soit $\chi \in C_0^\infty([0,\infty[)$ valant 1 près du compact $\{s \geq 0, 1-\Gamma_d(s) \leq 1-\delta\}$. Alors $\forall f \in E_\tau$, $f = \chi(-h^2\Delta_g) f$ et d'après le lemme 3, on a

$$(|\Delta_h| - |\Delta_h^0|)\chi(-h^2\Delta_g) = -2(d+2)A_h$$

Comme A_h est borné dans L^2, on a, d'après (20), l'existence de $C_- = C_-(\delta)$ indépendant de τ, h telle que pour tout $f \in E_\tau$, on a

$$< |\Delta_h| f, f >_{L^2(M, Z_h d\nu_h)} \leq 2(\tau + C_-)(d+2) ||f||^2_{L^2(M, Z_h d\nu_h)}$$

Ceci implique d'après le théorème du min-max

$$N_0(1-\tau h^2, h) = \dim(E_\tau) \leq N(1-(\tau + C_-)h^2, h) \tag{21}$$

Il nous reste à montrer une inégalité du même type dans le sens inverse. Soit F_τ le supplémentaire orthogonal de E_τ dans $L^2(M, d_g x)$. Soit $\theta \in C_0^\infty$ tel que

$$||T_h(1-\theta)(-h^2\Delta_g)||_{L^2} \leq \delta$$

Soit χ, ψ définie par

$$\begin{aligned} &\chi \in C_0^\infty \\ &\chi \in [0,1] \\ &\chi = 1 \text{ près de } [0, 1-\delta] \cup \mathit{support}(\theta) \\ &\psi = 1 - \chi \text{ tel que } (1-\theta)\psi = \psi \end{aligned}$$

Soit A_h, B_h donnés par le lemme 3 par les formules suivantes

$$\begin{aligned} A_h &= (|\Delta_h| - |\Delta_h^0|)\chi(-h^2\Delta_g) \in \varepsilon_{cl}^{-\infty} \\ B_h &= \chi(-h^2\Delta_g)(|\Delta_h| - |\Delta_h^0|) \in \varepsilon_{cl}^{-\infty} \end{aligned}$$

On a alors

$$|\Delta_h| = \chi|\Delta_h^0|\chi + \psi|\Delta_h^0|\chi + \chi|\Delta_h^0|\psi + \psi|\Delta_h|\psi + A_h + B_h\psi$$

L'opérateur $A_h + B_h\psi$ étant borné sur L^2 par une constante $C(\delta)$ uniformément en h, il vient de $\psi(1-T_h)\psi = \psi^2 - \psi T_h(1-\theta)\psi$ que

$$< \psi|\Delta_h|\psi f, f >_{L^2(M,d_g x)} \geq 2(1-\delta)\frac{d+2}{h^2}||\psi f||_{L^2(M,d_g x)}$$

D'après ceci et (20), on déduit qu'il existe $C_+ = C_+(\delta) > 0$ indépendante de τ, h telle que pour tout $f = \sum_{\lambda_j > \tau} x_j e_j \in F_\tau$, on a

$$\begin{aligned}
& < |\Delta_h| f, f >_{L^2(M, Z_h d\nu_h)} + (d+2)C_+ ||f||^2_{L^2(M, Z_h d\nu_h)} \\
\geq & \sum_{\lambda_j > \tau} \phi_h(h^2\lambda_j)(\chi^2 + 2\chi\psi)(h^2\lambda_j)|x_j|^2 \\
& + 2(1-\delta)\frac{d+2}{h^2}\sum_{\lambda_j > \tau} \psi^2(h^2\lambda_j)|x_j|^2 \\
\geq & \, 2\tau(d+2)\sum_{\lambda_j > \tau}|x_j|^2 \\
\geq & \, (2\tau(d+2) - Ch^2)||f||^2_{L^2(M, Z_h d\nu_h)}
\end{aligned}$$

Ceci implique, d'après le théorème du min-max que, il existe h_0 petit tel que, pour τ assez grand, $\forall h \in]0, h_0]$,

$$N_0(1 - \tau h^2, h) = codim(F_\tau) \geq N(1 - (\tau - C_+)h^2, h) \tag{22}$$

On obtient alors l'estimée de Weyl (7) en combinant (17), (21) et (22).

Enfin, l'estimée (9) résulte du lemme 7 en prenant $j = d/2$ et en se souvenant que $H^{d/2}$ s'injecte dans L^∞ et que les fonctions propres e^h sont normées pour la norme L^2.

2.3 Analyse de M

Rappelons que d'après (2.1) et (5), on a

$$(M_h f)(x) = m_h(x)f(x) + \frac{1}{|B(x,h)|}\int_{B(x,h)} \min(1, A(x,y))f(y)d_g y$$

avec

$$A(x,y) = \frac{|B(x,h)|}{|B(y,h)|}$$

On a donc

$$(M_h f)(x) = m_h(x)f(x) + \int_{B(x,h)} \min(\frac{1}{|B(x,h)|}, \frac{1}{|B(y,h)|})f(y)d_g y \tag{23}$$

avec

$$m_h(x) = 1 - \int_{B(x,h)} \min(\frac{1}{|B(x,h)|}, \frac{1}{|B(y,h)|})d_g y \in [0,1[\tag{24}$$

Comme on a montré la convergence de l'algorithme pour T_h, on aimerait en déduire celle pour M_h. En fait, on va montrer que M_h n'est qu'une perturbation de T_h et que son spectre est proche de celui de T_h. Ainsi on aura les mêmes résultats que pour T_h car comme pour le cas fini, la vitesse de convergence d'une CM dépend uniquement des valeurs propres de la matrice (analogue ici au spectre de l'opérateur R_h)

2.3.1 Deuxième théorème fondamental

Il existe h_0 assez petit, $\gamma < 1$, $C_1 > 0$ tels que $\forall 0 < h < h_0$,
- $\mathrm{Spec}(M_h) \subset [-\gamma, 1]$
- 1 est valeur propre simple de M_h
- Le spectre de M_h est discret en dehors de $[0, C_1 h^3]$

Soit

$$Ch^3 < ... \leq \tilde{\mu}_{k+1}(h) \leq \tilde{\mu}_k(h) \leq ... \leq \tilde{\mu}_1(h) < \tilde{\mu}_0(h) = 1$$

les valeurs propres positives de M_h. Pour tout $L > 0, \exists C_2 > 0, \forall 0 < h < h_0, \forall k \leq L$, on a

$$|\frac{1 - \tilde{\mu}_k(h)}{h^2} - \frac{\lambda_k}{2(d+2)}| \leq C_2 h \tag{25}$$

Soit $\tilde{N}(a,h)$ le nombre de valeur propre de M_h dans l'intervalle $[a,1]$. On a l'estimée de Weyl suivante sur $\tilde{N}(1-\tau h^2, h)$:

$\forall \delta \in]0,1[, \quad \forall \tau \in [0, (1-\delta)h^{-2}]$

$$|\tilde{N}(1-\tau h^2, h) - (2\pi h)^{-d} \int_{\Gamma_d(|\xi|_x^2) \in [1-\tau h^2, 1]} dx d\xi| \leq C_{\delta,1}(1+\tau)^{(d-1)/2}$$

où $dxd\xi$ est la forme volume sur le fibré tangent associé à la variété M et où $|\xi|_x$ est la longueur relative à d_g du vecteur tangent ξ au point x. En particulier, on a

$$\tilde{N}(1-\tau h^2, h) \leq C_\delta (1+\tau)^{d/2} \tag{26}$$

De plus, on a que pour toute fonction propre $\tilde{e}_k^h$ de M_h associée à la valeur propre $\tilde{\mu}_k(h) \in [\delta, 1]$,

$$||\tilde{e}_k^h||_{L^\infty} \leq C_\delta (1+\tilde{\tau}_k(h))^{d/4} ||\tilde{e}_k^h||_{L^2} \tag{27}$$

avec $\tilde{\tau}_k(h) = h^{-2}(1-\tilde{\mu}_k(h))$. Enfin, il existe A tel que $\forall h \in]0, h_0]$,

$$e^{-\gamma_1(h) n h^2} \leq 2 \sup_{x \in M} ||\mathcal{M}_h^n(x,y) d_g y - d\mu||_{TV} \leq A e^{-\gamma_2(h) n h^2} \tag{28}$$

et ceci pour tout n, où γ_1 et γ_2 sont deux fonctions positives vérifiant

$$\gamma_1(h) \simeq \gamma_2(h) \simeq \frac{\lambda_1}{2(d+2)}$$

2.3.2 Démonstration

Rappel des notations et preuve des premières assertions

D'après (23) et (24), on a :

$$M_h = T_h + R_h$$

avec

$$R_h(f)(x) = m_h(x) f(x) + \int_{B(x,h)} \min\left(\frac{1}{|B(y,h)|} - \frac{1}{|B(x,h)|}, 0\right) f(y) d_g y$$

Posons $a : (x,y,h) \to a(x,y,h)$, la fonction négative définie par :

$$a(x,y,h) = h^{d-2} \min\left(\frac{1}{|B(y,h)|} - \frac{1}{|B(x,h)|}, 0\right)$$

D'après (2.2.3), on a qu'il existe une constante $C > 0$ telle que $\forall x, y, h$,

$$\begin{aligned} &|\nabla_x a(x,y,h)| + |\nabla_y a(x,y,h)| \leq C \\ &|a(x,y,h)| \leq C d_g(x,y) \end{aligned} \tag{29}$$

Comme $R_h(1) = M_h(1) - T_h(1) = 0$, et que

$$R_h(f)(x) = m_h(x)f(x) + h^{2-d} \int_{B(x,h)} f(y)a(x,y,h)d_g y$$

on a

$$m_h(x) = -h^{2-d} \int_{B(x,h)} a(x,y,h)d_g y$$

D'après (29), on a

$$\begin{aligned} ||m_h(x)||_{L^\infty} &\leq Ch^3 \\ ||\nabla m_h(x)||_{L^\infty} &\leq Ch^2 \end{aligned} \tag{30}$$

et on en déduit (probablement grâce aux injections de Sobolev) que

$$\begin{aligned} ||R_h||_{L^p} &\leq Ch^3 \\ ||R_h||_{W^{1,p}} &\leq Ch^2 \end{aligned}$$

Par conséquent, M_h est bien une perturbation de T_h. Comme $||R_h||_{L^2} \leq Ch^3$, chaque valeur propre de T_h est à une distance inférieure à Ch^3 à la valeur propre de T_h qui lui est associée. On en déduit que :

- $\exists h_0 > 0, \gamma < 1$ tels que $\mathrm{Spec}(M_h) \subset [-\gamma, 1]$
- 1 est valeur propre simple de M_h
- Le spectre de M_h est discret en dehors de $[0, Ch^3]$ (car $\mathrm{Spec}(M_h)\backslash\{0\}$ est discret et $m_h(x) \geq 0$ avec $||m_h(x)||_{L^\infty} \leq Ch^3$

D'après le théorème 1 et (30), on a

$$|\frac{1-\tilde{\mu}(h)}{h^2} - \frac{\lambda_k}{2(d+2)}| \leq C_2 h$$

De plus, comme $||T_h - M_h||_{L^2} \leq Ch^3$, l'estimée de Weyl (7) reste valide en remplaçant le nombre de valeur propre $N(a,h)$ de T_h appartenant à $[a,1]$ par le nombre de valeur propre $\tilde{N}(a,h)$ de M_h appartenant à $[a,1]$. (26) est donc vrai. En reprenant la démonstration de (8) (qui n'utilise que l'estimée de Weyl) pour l'opérateur M_h, on obtient (27).

Afin de simplifier la démonstration, on admet que, grâce aux résultats précédents, on peut montrer que (9) est toujours vrai pour M_h, c'est-à-dire que (28) est vraie.

Preuve de l'estimée de variation totale

Le seul point qu'il nous reste à démontrer est la vitesse de convergence de l'itérée de M_h. Autrement dit, on veut montrer (28) :

$$e^{-\gamma_1(h)nh^2} \leq 2 \sup_{x\in M} ||\mathcal{M}_h^n(x,y)d_g y - d\mu||_{TV} \leq Ae^{-\gamma_2(h)nh^2}$$

Soit Π_0 le projecteur orthogonal dans $L^2(M)$ sur l'espace des fonctions constantes :

$$(\Pi_0 f)(x) = \frac{1}{Vol(M)} \int_M f(y) d_g y$$

Préférant travailler avec des estimées fonctionnelles, on a la relation suivante :

$$2 \sup_{x \in M} ||\mathcal{M}_h^n(x,y) d_g y - d\mu||_{TV} = ||M_h^n - \Pi_0||_{L^\infty \to L^\infty}$$

On doit donc montrer que

$$e^{-\gamma_1(h) n h^2} \leq ||M_h^n - \Pi_0||_{L^\infty \to L^\infty} \leq A e^{-\gamma_2(h) n h^2} \tag{31}$$

Par définition de $\tilde{e}_1^h$, on a

$$(M_h^n - \Pi_0)(\tilde{e}_1^h) = (1 - h^2 \tilde{\tau}_1^h)^n \tilde{e}_1^h$$

avec $|\tilde{\tau}_1^h - \frac{\lambda_1}{2(d+2)}| \leq Ch$ d'après

Ainsi

$$\begin{aligned} ||M_h^n - \Pi_0||_{L^\infty \to L^\infty} &\geq (1 - h^2 \tilde{\tau}_1^h)^n \\ &\geq e^{n \ln(1 - h^2 \tilde{\tau}_1^h)} \\ &\geq e^{-n h^2 \gamma_1(h)} \end{aligned}$$

avec

$$\begin{aligned} \gamma_1(h) &= -\frac{\ln(1 - h^2 \tilde{\tau}_1^h)}{h^2} \\ &\sim_{h \to 0} \tilde{\tau}_1^h \\ &\sim_{h \to 0} \frac{\lambda_1}{2(d+2)} \end{aligned}$$

La première inégalité de 28 est donc démontrée. Mais c'est la seconde qui est la plus intéressante et la plus utile. Soit $\delta \in]0,1[$ tel que le spectre de M_h soit contenu dans $[-\delta, 1]$. On décompose ensuite M_h en trois composantes correspondant chacune à une région du spectre de M_h :

$$M_h = \Pi_0 + M_{h,1} + M_{h,2} \tag{32}$$

avec

- Π_0 le projecteur précédemment défini correspondant à la valeur propre 1

- $M_{h,1}$ correspondant aux valeurs propres appartenant à $[\delta, 1]$ défini par son noyau $\mathcal{M}_{h,1}$

$$\mathcal{M}_{h,1}(x,y) = \sum_{\delta \leq \tilde{\mu}_k(h) < 1} (1 - h^2 \tilde{\tau}_k(h)) \tilde{e}_k^h(x) \tilde{e}_k^h(y)$$

- $M_{h,2}$ correspondant aux valeurs propres appartenant à $[-\delta, \delta[$ défini par son noyau $\mathcal{M}_{h,2}$

$$\mathcal{M}_{h,2}(x,y) = \sum_{-\delta \leq \tilde{\mu}_k(h) < \delta} (1 - h^2 \tilde{\tau}_k(h)) \tilde{e}_k^h(x) \tilde{e}_k^h(y)$$

Comme les $\tilde{e}_k^h$ sont orthogonaux, les trois éléments $\Pi_0, \mathcal{M}_{h,1}, \mathcal{M}_{h,2}$ sont orthogonaux et donc

$$M_h^n = \Pi_0 + M_{h,1}^n + M_{h,2}^n \tag{33}$$

Il suffit alors d'obtenir l'inégalité 31 pour chacun des deux termes $M_{h,1}$ et $M_{h,2}$. Commençons par $M_{h,1}$.

Montrons que $||M_{h,1}||_{L^\infty \to L^\infty} \leq C' e^{-nh^2 \tilde{\tau}_1(h)}$

D'après (27), comme les $\tilde{e}_k^h$ sont normés dans L^2, on a

$$\begin{aligned}
&||M_{h,1}||_{L^\infty \to L^\infty} \\
&\leq \sum_{\tilde{\tau}_1(h) \leq \tilde{\tau}_k(h) < (1-\delta)h^{-2}} (1 - h^2 \tilde{\tau}_k(h))^n (1 + \tilde{\tau}_k(h))^\alpha \\
&\leq \sum_{\tilde{\tau}_1(h) \leq \tilde{\tau}_k(h) < (1-\delta)h^{-2}} e^{-nh^2 \tilde{\tau}_k(h)} (1 + \tilde{\tau}_k(h))^\alpha \\
&\leq C \int_{\tilde{\tau}_1(h)}^\infty e^{nh^2 x} (1+x)^\beta dx
\end{aligned}$$

où l'on a successivement utilisé $1 - x \leq e^{-x}$ et l'estimée (26) sur le nombre de valeurs propres appartenant à $[\delta, 1]$. Par un *simple calcul*, on obtient finalement

$$||M_{h,1}||_{L^\infty \to L^\infty} \leq C' e^{-nh^2 \tilde{\tau}_1(h)}, \ \forall n \geq C_0 h^{-2} \tag{34}$$

Montrons que $||M_{h,2}||_{L^\infty \to L^\infty} \leq C e^{n\mu}$

D'après (32), comme Π_0, M_h^n sont bornés dans L^∞ et comme $M_{h,1}^n$ vérifie (34), on a que $M_{h,2}$ est bornée dans L^∞ et plus précisément,

$$\begin{aligned}
&\exists C_1 > 0, m > 0, \\
&||M_{h,2}||_{L^\infty \to L^\infty} \leq C_1 h^{-m}
\end{aligned} \tag{35}$$

D'autre part, on sait que $\mathcal{M}_h$ peut se décomposer en

$$\mathcal{M}_h = \Updownarrow_h + \mathcal{K}_h \tag{36}$$

On a les estimées suivantes :

$$\begin{aligned} &||m_h||_{L^\infty \to L^\infty} \leq \gamma < 1 \\ &||K_h||_{L^\infty \to L^\infty} \leq C_2 h^{-d/2} \end{aligned} \tag{37}$$

D'après (36), on peut écrire

$$M_h^p = A_{p,h} + B_{p,h}$$

avec les relations de récurrence suivantes

$$\left.\begin{aligned} &A_{1,h} = m_h \\ &B_{1,h} = K_h \\ &A_{p+1,h} = m_h A_{p,h} \\ &B_{p+1,h} = m_h B_{p,h} + K_h M_h^p \end{aligned}\right\} \tag{38}$$

Comme M_h^p est borné par 1 dans L^2, on a, par récurrence, les estimées suivantes, établies d'après (38) et (37),

$$\begin{aligned} &||A_{p,h}||_{L^\infty \to L^\infty} \leq \gamma^p \\ &||B_{p,h}||_{L^2 \to L^\infty} \leq C_2 h^{-d/2}(1 + \gamma + ... + \gamma^p) \leq C_2 \frac{h^{-d/2}}{1-\gamma} \end{aligned} \tag{39}$$

Par définition de $M_{h,2}$ (comme ses valeurs propres appartiennent à $[{\scriptstyle\delta}, \delta]$), on a

$$||M_{h,2}||_{L^\infty \to L^2} \leq ||M_{h,2}||_{L^2 \to L^2} \leq \delta^n$$

En combinant toutes les estimées précédentes et les formules de récurrence, c'est-à-dire d'après (39, 35, 38), on a

$$\begin{aligned} ||M_{h,2}^{p+q}||_{L^\infty \to L^\infty} &= ||M_h^p M_{h,2}^q||_{L^\infty \to L^\infty} \\ &\leq ||A_{p,h} M_{h,2}^q||_{L^\infty \to L^\infty} + ||B_{p,h} M_{h,2}^q||_{L^\infty \to L^\infty} \\ &\leq C_1 h^{-m} \gamma^p + C_2 h^{-d/2} \frac{\delta^q}{1-\gamma} \end{aligned}$$

Ceci implique qu'il existe $C, \mu > 0$ tels que

$$||M_{h,2}^n||_{L^\infty \to L^\infty} \leq C e^{-n\mu}, \ \forall n \geq 1/h \tag{40}$$

Conclusion

D'après (33), (34) et (40), on a

$$\begin{aligned} ||M_h^n - \Pi_0||_{L^\infty \to L^\infty} &\leq ||M_{h,1}^n||_{L^\infty \to L^\infty} + ||M_{h,2}^n||_{L^\infty \to L^\infty} \\ &\leq C' e^{-nh^2 \tilde{\tau}_1(h)} + C e^{-n\mu} \\ &\leq \max(C', C)(e^{-nh^2 \tilde{\tau}_1(h)} + e^{-n\mu}) \end{aligned}$$

Or, il existe h_0 tel que si $h < h_0$ alors $h^2 \tilde{\tau}_1(h) < \mu$. Donc, il existe $A = 2\max(C', C) > 0$ tel que pour $h < h_0$, on a :

$$||M_h^n - \Pi_0||_{L^\infty \to L^\infty} \leq A e^{-nh^2 \tilde{\tau}_1(h)}$$

2.3.3 Extension à la simulation de $\rho d_g x$

Remarquons que si on impose que ρ soit C^1, on a toujours (29). Ainsi M_h est toujours une perturbation de T_h. Les propriétés de T_h étant toujours vraies, la démonstration précédente est toujours valide. Ainsi,on peut essayer de simuler

$$\rho(x) d_g x$$

au moyen de

$$M_h(f)(x) = m_h(x) f(x) + \int_{y \in B(x,h)} \min(\frac{\rho(y)}{|B(y,h)|}, \frac{\rho(x)}{|B(x,h)|}) f(y) d_g y$$

où

$$m_h(x) = 1 - \int_{y \in B(x,h)} \min(\frac{\rho(y)}{|B(y,h)|}, \frac{\rho(x)}{|B(x,h)|}) d_g y$$

car le théorème 2, énonçant notamment la vitesse de convergence exponentielle de M_h vers $\rho d_g x$, reste vrai.

Références

[GL10] Laurent Michel Gilles Lebeau. Semi-classical analysis of a random walk on a manifold. *The annals of probability*, 38, 2010.