L'EQUATION DE SCHRÖDINGER QUAND h TEND VERS ZERO ; UNE APPROCHE PROBABILISTE

par R. AZENCOTT et H. DOSS

0. INTRODUCTION :

Soit W un ouvert de $\mathbb{R}^n$ et V une application suffisamment régulière de W dans $\mathbb{R}$. L'équation de Schrödinger, associée au potentiel V (et à une masse unité), s'écrit :

$$(0.1) \qquad (i \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2} h\Delta - \frac{V}{h})\psi = 0$$

où ψ est une application de $[0,T] \times W$ dans $\mathbb{C}$ $(T > 0)$, vérifiant la condition initiale :

$$(0.2) \qquad \psi(o,x) = f(x) \exp(\frac{i}{h} s(x))$$

Ici Δ est le Laplacien usuel, h est la constante de Planck, f et s deux fonctions à valeurs dans $\mathbb{R}$.

L'étude du comportement de ψ lorsque h tend vers zéro permet l'interprétation de la mécanique classique comme limite de la mécanique quantique et a été abordée par de nombreux auteurs (Albeverio et Krohn [1], Elworthy, Truman [8], [11] entre autres).

Les méthodes utilisées (phase stationnaire appliquée à "l'intégrale de Feynmann") présentent de sérieuses difficultés techniques, contrairement à l'approche que nous proposons ici qui permet de traiter aisément des situations nouvelles : en particulier, les potentiels que nous considérons ne sont pas nécessairement des transformées de Fourier de mesures bornées mais peuvent avoir des singularités à la frontière de l'ouvert W ou bien être des polynômes, vérifiant certaines conditions, de degré aussi élevé que l'on veut (Cf. le paragraphe (4.29)).

Cette approche est basée sur l'idée de la représentation probabiliste de ψ (Doss [6]) et présente des analogies avec la méthode de Laplace pour des intégrales de Wiener (Azencott [3], Elworthy-Truman [8], Schilder [10]).

Elle permet, de la même façon, de considérer le cas où Δ est un opérateur différentiel d'ordre 2 à coefficients non constants, y compris bon nombre de situations où Δ n'est pas elliptique mais, par exemple, hyperbolique. (Cf. Azencott, Bellaïche, Doss [4]).

1. LES HYPOTHESES ET LA REPRESENTATION PROBABILISTE DE ψ :

Soit D l'ouvert de $\mathbb{C}^n$ défini par :

$$D = \{x + \sqrt{i}\, y \quad \text{où} \quad x = (x_1,\dots,x_n) \in W \quad \text{et} \quad y = (y_1,\dots,y_n) \in \mathbb{R}^n\}$$

On va supposer que le potentiel V et les données initiales f,s vérifient les hypothèses de régularité suivantes :

(1.1) V,f,s admettent des prolongements analytiques (notés V,f,s) dans l'ouvert D.

(1.2) (croissance modérée de V,f,s à l'infini).

Pour chaque $x_0 \in W$, on peut trouver un voisinage U de x_0 et des constantes positives c_1,c_2,c_3, d_1,d_2,d_3 telles que, lorsque (x,y) décrit $U \times \mathbb{R}^n$, on ait :

i) $\operatorname{Im} V(x + \sqrt{i}\, y) \leq c_1 + d_1 \|y\|^2$

ii) $-\operatorname{Im} s(x + \sqrt{i}\, y) \leq c_2 + d_2 \|y\|^2$

iii) $|f(x + \sqrt{i}\, y)| + |V(x + \sqrt{i}\, y)| \leq \exp(c_3 + d_3 \|y\|^2)$

où $\|y\| = \sup_{j=1,\dots,n} |y_j|$ avec, de plus :

iv) $Td_1 + d_2 + 2h\, d_3 < \frac{1}{2T}$.

Notons que, W' étant un ouvert borné inclus dans W, si les conditions i), ii), iii) sont satisfaites alors la condition iv) est automatiquement vérifiée pour T et h assez petits, uniformément sur W'.

Soit $B = (B_t)_{t \in [0,T]}$ le mouvement Brownien usuel, issu de zéro, à valeurs dans $\mathbb{R}^n$. D'après [6] (hypothèses légèrement différentes ici), on a le :

(1.3) Théorème (Doss, [6]) :

Sous les hypothèses (1.1) et (1.2), il existe une solution forte unique $\psi = (\psi(t,x))_{(t,x)\in[0,T]\times W}$ du problème (0.1), (0.2) qui vérifie la condition suivante : $\psi = (\psi(t,x))_{(t,x)\in[0,T]\times W}$ se prolonge en une fonction de classe C^1 sur $[0,T] \times D$, analytique en x $(x \in D)$.

On a, de plus, la représentation probabiliste suivante :

(1.4) $$\psi(t,x) = E\{f(x+\sqrt{ih}\,B_t)\exp\left[\frac{1}{ih}\left(-s(x+\sqrt{ih}\,B_t) + \int_0^t V(x+\sqrt{ih}\,B_u)du\right)\right]\}$$
si $(t,x) \in [0,T] \times D$.

Remarque : Pour faire le lien entre les hypothèses (1.2) et celles, plus faibles, de [6], noter que la représentation intégrale de Cauchy pour une fonction holomorphe g permet de propager des majorations du type :
$|g(x+\sqrt{i}\,y)| \leq \exp(c + d\,\|y\|^2)$, en des majorations analogues pour les dérivées de g.

2. UNE ETUDE HEURISTIQUE PRELIMINAIRE :

Soit $(t,x) \in [0,T] \times W$ et $\Omega = \mathcal{C}([0,T],\mathbb{R}^n)$, l'espace des fonctions continues sur $[0,T]$, à valeurs dans $\mathbb{R}^n$, nulles en zéro, muni de la norme uniforme sur $[0,T]$.

Introduisons la fonctionnelle différentiable sur Ω définie par :

(2.1) $$F(\omega) = s(x+\sqrt{i}\,\omega_t) - \int_0^t V(x+\sqrt{i}\,\omega_u)du,$$

de sorte que, en posant $\varepsilon = \sqrt{h}$, (1.4) devient :

(2.2) $$\psi(t,x) = E\{f(x+\sqrt{i}\,\varepsilon B_t)\exp(\frac{i}{\varepsilon^2}\,F(\varepsilon B))\},$$

où B est la trajectoire de (B_u) sur $[0,T]$.

Considérons la fonctionnelle λ de Ω dans $[0,+\infty]$ définie par :

$\lambda(\omega) = \frac{1}{2}\int_0^t |\dot{\omega}_u|^2 du$ lorsque la dérivée $\dot{\omega}$ existe et appartient à $L^2([0,t])$,

$\lambda(\omega) = +\infty$ sinon.

Alors on sait que $P\{\varepsilon B \in \mathcal{V}(\omega)\}$ où $\mathcal{V}(\omega)$ est un tube d'axe ω est "de l'ordre" de $\exp(-\frac{\lambda(\omega)}{\varepsilon^2})$ lorsque $\varepsilon \to 0$ (Cf. Azencott [2], Ventsel - Freidlin [12]).

Par suite (2.2) s'écrit :

$$(2.3) \qquad \psi(t,x) \simeq \sum_{\omega} f(x + \sqrt{i}\,\omega_t)\exp\left(\frac{i}{\varepsilon^2}F(\omega) - \frac{\lambda(\omega)}{\varepsilon^2}\right)$$

où la "somme" est étendue à un réseau "suffisamment fin" de $\omega \in \Omega$, ce qui encore peut se formaliser par :

$$(2.4) \qquad \psi(t,x) \simeq \int f(x + \sqrt{i}\,\omega_t)\exp\left(\frac{i}{\varepsilon^2}F(\omega) - \frac{\lambda(\omega)}{\varepsilon^2}\right) \mathcal{D}(\omega)$$

où le $\mathcal{D}(\omega)$ est laissé à l'imagination du lecteur. Noter l'analogie avec le formalisme à la Feynman, courant en physique mathématique.

Dans une telle "intégrale", la partie prépondérante, comme on le déduit de la méthode de la phase stationnaire classique, s'obtient au voisinage du chemin η tel que $[i\,F(\omega) - \lambda(\omega)]$ atteigne un <u>extrémum</u> en η

L'interprétation pratique de ce formalisme, dans le cas réel, consiste (Cf. Azencott [3]) à remplacer le processus $X_t^\varepsilon = \varepsilon B_t$ par $Y_t^\varepsilon = X_t^\varepsilon - \eta_t$ et à appliquer la formule de Cameron - Martin en translatant par η.

Mais il se trouve que, dans le problème considéré ici, "le" chemin η rendant extrémale en ω l'expression $[i\,F(\omega) - \lambda(\omega)]$ est de la forme $\eta = \frac{\gamma}{\sqrt{i}}$ où γ est un chemin <u>réel</u> rendant extrémale la fonctionnelle <u>réelle</u> suivante :

$$(2.5) \qquad F\left(\frac{\omega}{\sqrt{i}}\right) + \lambda(\omega) = s(x + \omega_t) - \int_0^t V(x + \omega_u)du + \frac{1}{2}\int_0^t |\dot{\omega}_u|^2 du.$$

Il s'agira donc d'obtenir, d'abord, une formule de Cameron - Martin lorsque la translation η est un chemin à valeurs complexes. On remarque alors que le terme principal dans l'expression (2.4) est égal à $\exp\left[\frac{i}{\varepsilon^2}(\lambda(\gamma) - A^\gamma(t,x))\right]$ où

$$A^\gamma(t,x) = \int_0^t V(x+\gamma_u) - s(x+\gamma_t)$$

(γ) étant la trajectoire "classique" rendant extrémale la fonctionnelle d'action (2.5).

3. LA FORMULE DE CAMERON - MARTIN ET SON PROLONGEMENT ANALYTIQUE :

(3.1) Théorème :

Soit $(t,x) \in [0,T] \times D$ et $\tilde{\Omega}_{(t,x)}$ l'ensemble des applications continues γ de $[0,t]$ dans $\mathbb{C}^n$, nulles en zéro, à dérivée de carré intégrable sur $[0,t]$, telles que $\{x + \sqrt{i}\,\gamma_u,\ u \in [0,t]\} \subseteq D$.

Posons $\varepsilon = \sqrt{h}$ et considérons, F étant la fonctionnelle définie en (2.1),

$$(3.2)\quad T(\gamma) = E\{f(x+\sqrt{i}(\varepsilon B_t + \gamma_t))\exp(\frac{i}{\varepsilon^2}F(\varepsilon B+\gamma))\exp(-\frac{1}{\varepsilon}\int_0^t \dot{\gamma}_u\, dB_u - \frac{1}{2\varepsilon^2}\int_0^t (\dot{\gamma}_u)^2 du\}$$

où $(\dot{\gamma}_u)^2 = \dot{\gamma}^2_{1,u} + \dots + \dot{\gamma}^2_{n,u}$; $\gamma_u = (\gamma_{j,u})_{j=1,\dots,n}$

Alors la formule de Cameron - Martin usuelle qui s'écrit $T(\gamma) \equiv T(0)$ lorsque γ est à valeurs réelles, reste vraie, sous les hypothèses (1.1) et (1.2), pour $\gamma \in \tilde{\Omega}_{(t,x)}$.

Preuve : L'hypothèse (1.2) montre que $T(\gamma)$ est bien défini pour $\gamma \in \tilde{\Omega}_{(t,x)}$.
Commençons par montrer que $T(\gamma) = T(0)$ lorsque γ est de la forme $\gamma = i\,\phi$ où ϕ est une trajectoire à valeurs $\mathbb{R}^n$ telle que $\sup_{u \in [0,t]} |\phi_u| \leq r$ où $r > 0$ est choisi de sorte que la boule fermée $U(x,r)$ soit contenue dans D.
Soit $z \in \mathbb{C}$ et $g(z) = T(z\,\gamma) = T(z\,i\,\phi)$, $|z| \leq 1$.
L'hypothèse (1.2) montre que la fonction g est holomorphe sur le disque unité de $\mathbb{C}$. D'autre part, la formule de Cameron - Martin habituelle montre que $g(u/i) = T(u\,\phi) = T(0)$ si $u \in \mathbb{R}$. On en déduit que g est constante et que $T(i\,\phi) = T(0)$.

Supposons maintenant que ϕ soit une trajectoire à valeurs $\mathbb{R}^n$ telle que $\gamma = i\,\phi \in \tilde{\Omega}_{(t,x)}$. Il existe une subdivision de $[0,t]$: $0 = t_o < t_1 < \ldots < t_n = t$ telle que, pour tout $j \in \{0,1,\ldots,n-1\}$ on ait $\sup\limits_{u\in[t_j,t_{j+1}]} |\gamma_u - \gamma_{t_j}| < r_j$ où

$r_j > 0$ est choisi de sorte que $U(x + \sqrt{i}\,\gamma_{t_j}, r_j) \subseteq D$.

En appliquant la propriété de Markov, on se restreint aux intervalles $[t_j,t_{j+1}]$ pour montrer que $T(i\,\phi) = T(0)$.

Soit γ un élément quelconque de $\tilde{\Omega}_{(t,x)}$, alors on peut écrire $\gamma = \gamma^{(1)} + i\,\gamma^{(2)}$ où $\gamma^{(1)}$ et $\gamma^{(2)}$ sont des trajectoires à valeurs réelles. On vérifie que $i\,\gamma^{(2)} \in \tilde{\Omega}_{(t,x)}$ et la démonstration précédente entraîne que

$T(i\,\gamma^{(2)}) = T(0)$. Il suffit ensuite d'utiliser la formule de Cameron - Martin habituelle en faisant une translation sur l'espace canonique $\mathcal{C}([0,t],\mathbb{R}^n)$ de vecteur $\frac{1}{\varepsilon}\gamma^{(1)}$ pour remarquer que

$$T(\gamma) = T(i\,\gamma^{(2)} + \gamma^{(1)}) = T(i\,\gamma^{(2)}) = T(0)$$

4. DEVELOPPEMENTS ASYMPTOTIQUES :

Soit $(t,x) \in]0,T] \times W$. Considérons, si elle existe, une application γ de classe C^2 de $[0,t]$ dans $\mathbb{R}^n$ qui soit solution du problème suivant :

(4.1) 1) $\{x + \gamma_u,\ u \in [0,t]\} \subseteq W$

2) $\ddot{\gamma}_u = -\operatorname{grad} V(x + \gamma_u)$; $u \in [0,t]$

3) $\gamma_o = 0$ et $\dot{\gamma}_t = -\operatorname{grad} s(x + \gamma_t)$.

Remarquons que γ est une trajectoire rendant extrémale la fonctionnelle d'action définie par (2.5).

(4.2) Théorème :

Soit $(t,x) \in]0,T] \times W$ et γ une solution, si elle existe, du problème (4.1).

Sous les hypothèses (1.1) et (1.2), notons $\psi(t,x)$ la solution de l'équation de Schrödinger (0.1), (0.2) donnée par (1.4). On a alors le développement suivant :

(4.3) $$\psi(t,x) = \exp\left(i \frac{S^\gamma(t,x)}{h}\right) E\{f(x + \sqrt{ih}\, B_t + \gamma_t) \exp\left(i \int_0^1 (1-v)dv\, D^2F(v\sqrt{h}\, B + \gamma/\sqrt{i})\, B^2\right)\}$$

où $S^\gamma(t,x) = \frac{1}{2}\int_0^t |\dot{\gamma}_u|^2 du - \int_0^t V(x + \gamma_u)du + s(x + \gamma_t)$

F est la fonctionnelle définie en (2.1) et D^2F la différentielle seconde de F :

$$D^2F(v\sqrt{h}\, B + \gamma/\sqrt{i})B^2 - i\left[D^2 s(x + v\sqrt{ih}\, B_t + \gamma_t)B_t^2 - \int_0^t D^2V(x + v\sqrt{ih}\, B_u + \gamma_u)B_u^2 du\right]$$

Preuve : Soit $\eta = \gamma/\sqrt{i}$. La condition (4.1) 1) montre que $\eta \in \tilde{\Omega}_{(t,x)}$.

Appliquons la formule de Cameron - Martin en effectuant une translation par η dans l'expression (1.4) donnant une représentation de $(\psi(t,x))$: en posant $\varepsilon = \sqrt{h}$, on a :

(4.4) $$\psi(t,x) = T(\eta) = E\{f(x + \sqrt{i}(\varepsilon B_t + \eta_t)) \exp\left(\frac{i}{\varepsilon^2} F(\varepsilon B + \eta)\right) \exp\left(-\frac{1}{\varepsilon}\int_0^t \dot{\eta}_u\, dB_u - \frac{1}{2\varepsilon^2}\int_0^t (\dot{\eta}_u)^2 du\right)\}$$

Soit $\theta(\varepsilon) = F(\varepsilon B + \eta)$. Alors θ est de classe C^∞ en ε. La formule de Taylor, avec reste intégral à l'ordre 2, montre que :

(4.5) $$\theta(\varepsilon) = \theta(0) + \theta'(0)\varepsilon + \varepsilon^2 \int_0^1 \theta''(v\varepsilon)(1-v)dv$$

où $\theta(0) = s(x + \gamma_t) - \int_0^t V(x + \gamma_u)du$

$$\theta'(0) = \sqrt{i}\ \mathrm{grad}s(x+\gamma_t)B_t - \int_0^t \mathrm{grad}\ V(x+\gamma_u)B_u du\}$$

$$\theta''(\varepsilon v) = i\ \{D^2 s(x+\sqrt{i}\ \varepsilon v B_t + \gamma_t)B_t^2 - \int_0^t D^2 V(x+\sqrt{i}\ \varepsilon v B_u + \gamma_u)B_u^2 du\}$$

Remplaçons $\theta(\varepsilon)$ par son développement (4.5) dans l'expression (4.4), on obtient:

(4.6) $$\psi(t,x) = \exp(\frac{i}{\varepsilon^2} S^\gamma(t,x))\ E\{f(x+\sqrt{i}\ \varepsilon B_t + \gamma_t)$$
$$\exp(\frac{1}{\varepsilon}(i\ \theta'(0) - \int_0^t \dot{\eta}_u dB_u) + i\int_0^1 \theta''(v\ \varepsilon)\ (1-v)dv)\}$$

Or on a choisi la trajectoire η pour que le terme en $\frac{1}{\varepsilon}$ figurant dans l'égalité (4.6) disparaisse. En effet, on a

(4.7) $$i\ \theta'(0) = \int_0^t \dot{\eta}_u\ dB_u = \frac{1}{\sqrt{i}}\int_0^t \dot{\gamma}_u\ dB_u \qquad \text{p.s.}$$

puisque (4.7) est équivalent à :

(4.8) $$\int_0^t \mathrm{grad}\ V(x+\gamma_u)B_u du - \mathrm{grad}s(x+\gamma_t)B_t = \int_0^t \dot{\gamma}_u dB_u = \dot{\gamma}_t B_t - \int_0^t \ddot{\gamma}_u B_u du \quad \text{p.s.}$$

et $\dot{\gamma}_t = -\ \mathrm{grad}s(x+\gamma_t)$, $\ddot{\gamma}_u = -\ \mathrm{grad}\ V(x+\gamma_u)$ $\qquad (u \in [0,t])$. □

Le Théorème (4.2) donne une représentation de $H_{(t,x)}(h) = \psi(t,x)\ \exp(-\frac{i}{h}S^\gamma(t,x))$.

C'est l'espérance d'une fonctionnelle du mouvement Brownien, de classe C^∞ en $\sqrt{h}$. Pour obtenir un développement asymptotique en h, quand h tend vers zéro, nous allons nous placer sous les conditions d'application du Théorème de dérivation sous le signe somme, ce qui ne sera possible, sans hypothèse supplémentaire, qu'en se restreignant, pour tout $(t,x) \in]0,T] \times W$ (t assez petit), au voisinage d'une trajectoire $\gamma^{(t,x)}$, bien choisie, solution du problème (4.1).

Soit $X \in W$ et $v \in \mathbb{R}$. Considérons la solution $\begin{pmatrix} A_1(v,X) \\ A_2(v,X) \end{pmatrix}$ de l'équation différentielle suivante, définie pour tout v dans un voisinage de zéro :

$$(4.9) \quad \begin{cases} A_1(v,X) = X + \int_0^v A_2(u,X)du \\ \\ A_2(v,X) = -\operatorname{grad}s(X) - \int_0^v \operatorname{grad} V(A_1(u,X))du \end{cases}$$

On vérifie aisément que, pour tout $X_o \in W$, il existe un voisinage W_1 de 0 dans $\mathbb{R}$ et un voisinage W_2 de X_o dans W tels que si $(v,X) \in W_1 \times W_2$, la matrice Jacobienne $\frac{\partial A_1}{\partial X}(v,X)$ soit inversible.

(4.10) <u>Proposition</u> :

Soit $x \in W$. Considérons la solution $(f(t,x))$ de l'équation différentielle suivante, définie pour tout $t \in \mathbb{R}$, dans un voisinage de 0 :

$$(4.11) \quad \begin{cases} \frac{\partial f}{\partial t}(t,x) = \left(\frac{\partial A_1}{\partial X}\right)^{-1}(-t,f(t,x)) \left[\frac{\partial A_1}{\partial v}(-t,f(t,x))\right] \\ f(0,x) = x \end{cases}$$

Si $(t,x) \in]0,T] \times W$, le problème (4.1) admet une unique solution $\gamma = (\gamma^{(t,x)}(u))_{u \in [0,t]}$ analytique en (t,x,u), donnée pour tout t assez petit, par:

$$(4.12) \quad \gamma^{(t,x)}(u) = A_1(u-t, f(t,x)) - x \qquad (u \in [0,t])$$

<u>Preuve</u> : Pour tout t assez petit, l'égalité (4.11) montre que $\frac{\partial}{\partial t}\left[A_1(-t,f(t,x))\right] = 0$ et puisque $A_1(0, f(0,x)) = f(0,x) = x$, on en déduit que $A_1(-t, f(t,x)) \equiv x$. On voit alors immédiatement que la fonction $(\gamma^{(t,x)}_{(u)})_{u \in [0,t]}$ est bien solution du problème (4.1). Inversement, si $(\gamma_u^{(t,x)})$ est une solution de (4.1) analytique en (t,x,u), on voit que $f(t,x) = \gamma_t^{(t,x)} + x$ est analytique en (t,x) et vérifie l'équation différentielle ordinaire (4.11) pour tout t assez petit, d'où l'unicité de $f(t,x)$.

Pour $\gamma_t^{(t,x)} = X$ donné, la fonction $g(u) = \gamma_{t-u}^{(t,x)}$ vérifie l'équation différentielle ordinaire : $g''_u = -\operatorname{grad} V(x+g_u)$; $g'_o = \operatorname{grad} s(x+X)$, $g_o = X$,
elle est donc unique.

(4.13) Théorème :

Sous les hypothèses (1.1) et (1.2), on peut associer à tout compact K de W un nombre $T_K \in]0,T]$ ayant les propriétés suivantes :

i) Pour chaque $t \in [0,T_K], x \in K$, la solution $\gamma^{(t,x)}$ du problème (4.1), donnée par la formule (4.12), est bien définie.

ii) Il existe des fonctions à valeurs réelles $b_k(t,x)$ $k = 0,1,2,\dots$ telles que la solution ψ du problème (0.1), (0.2), donnée par (1.4), admette pour tout $N \in \mathbb{N}$, le développement asymptotique suivant, lorsque $h \to 0$:

$$\psi = \exp\left(\frac{i}{h} S\right) \{b_o + b_1 h + \dots + b_N h^N + o(h^N)\} \tag{4.14}$$

où l'argument (t,x) vérifie : $x \in K$, $t \in [0,T_K]$ et

$$S = S(t,x) = \frac{1}{2}\int_0^t |\dot{\gamma}_u^{(t,x)}|^2 - \int_0^t V(x+\gamma_u^{(t,x)})du + s(x+\gamma_t^{(t,x)}). \tag{4.15}$$

On a, pour $b_k(t,x)$, une expression explicite, donnée par la formule (4.22), du type $b_k = E\{P_k(B) \exp Q(B)\}$ où B est la trajectoire du mouvement Brownien sur $[0,t]$, P_k un "polynôme" de degré $2k$ (à "coefficients" formes multilinéaires sur $\mathcal{C}([0,t],\mathbb{R}^n)$ et Q la forme quadratique sur $\mathcal{C}([0,t],\mathbb{R}^n)$ définie par :

$$Q(\phi) = \frac{1}{2}\left[-D^2 s(x+\gamma_t^{(t,x)})\phi_t^2 + \int_0^t D^2 V(x+\gamma_u^{(t,x)})\phi_u^2 du\right] \tag{4.16}$$

En particulier $b_o = f(x+\gamma_t^{(t,x)})\, E\{\exp(Q(B))\}$.

<u>Preuve</u> : 1) Soit K un compact de W. On voit aisément qu'il existe un ouvert borné G tel que $K \in G$ et $\overline{G} \in W$ et un nombre $\tau \in]0,T]$ vérifiant la propriété suivante : pour tout $t \in [0,\tau]$, tout $u \in [0,t]$, et tout $x \in K$, on a $x + \gamma_u^{(t,x)} \in G$ si $\gamma = (\gamma_u^{(t,x)})$ est une solution du problème (4.1) donné par la formule (4.12). Posons $\varepsilon = \sqrt{h}$ et considérons la variable aléatoire :

$$(4.17) \qquad I_\varepsilon = f(x + \sqrt{i}\,\varepsilon B_t + \gamma_t) \exp(\frac{i}{\varepsilon^2}\left[F(\varepsilon B + \gamma/\sqrt{i})\right]) \exp(-\frac{1}{\sqrt{i}\,\varepsilon}\int_0^t \dot{\gamma}_u dB_u - \frac{1}{2i\,\varepsilon^2}\int_0^t |\dot{\gamma}_u|^2 du)$$

où F est donné par (2.1) et $t \in [0,\tau]$.

En remarquant que $\int_0^t \dot{\gamma}_u dB_u = \int_0^t \operatorname{grad} V(x+\gamma_u)B_u du - \operatorname{grad} s(x+\gamma_t)B_t$ et en utilisant l'hypothèse d'intégrabilité (1.2), on vérifie aisément qu'il existe trois constantes C_1, C_2, C_3 ne dépendant que de G telles que, pour tout $t \in [0,\tau]$ et tout $x \in K$, on ait :

$$|I_\varepsilon| \leq \exp(C_1 + \frac{C_2}{\varepsilon}\|B\|_T + C_3\|B\|_T^2)$$

où $\|B\|_T = \sup_{\substack{j=1,\dots,n \\ t \in [0,T]}} |B_j(t)|$ et où $C_3 < \frac{1}{2T}$

En utilisant, par exemple, le lemme 1 de [6], on en déduit qu'il existe $p > 1$ et deux constantes C_4 et C_5 telles que :

$$\|I_\varepsilon\|_p = E\{|I_\varepsilon|^p\}^{1/p} \leq C_4 \exp(\frac{C_5}{\varepsilon^2}), \text{ pour tout } t \in [0,\tau],\ x \in K.$$

Soit C_6 une constante > 0, on voit que si $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$:

$$|E\{I_\varepsilon 1_{(\varepsilon\|B\|_T \geq C_6)}\}| \leq \|I_\varepsilon\|_p (P\{\varepsilon\|B\|_T \geq C_6\})^{1/q}$$

$$\leq C_4 \exp(\frac{C_5}{\varepsilon^2})\, 2^{1/q} \exp(\frac{-C_6^2}{2\varepsilon^2 Tq})$$

A tout $R > 0$, on peut donc associer R' et $C > 0$ tels que, si $C_6 \geq C$, alors :

(4.18) $$|E\{I_\varepsilon 1_{(\varepsilon\|B\|_T \geq C_6)}\}| \leq R' \exp(-\frac{R}{\varepsilon^2})$$

2) Soit $t \in [0,\tau]$, $x \in K$, $(\psi(t,x))$ la solution du problème (0.1), (0.2) et $\gamma = (\gamma_u^{(t,x)})$ un chemin défini par la formule (4.12). On a $\psi(t,x) = E\{I_\varepsilon\}$ avec $\varepsilon = \sqrt{h}$ où I_ε est donnée par (4.17).

Soit ϕ une fonction de classe C^∞ à support compact telle que $0 \leq \phi \leq 1$, $\phi \equiv 1$ sur $[0,C]$, $\phi(u) = 0$, si $|u| \geq 2C$, ϕ paire. On a :
$\psi(t,x) = E\{I_\varepsilon \phi(\varepsilon\|B\|_T)\} + E\{I_\varepsilon (1-\phi(\varepsilon\|B\|_T))\}$ et (4.18) entraîne

$$|E\{I_\varepsilon(1-\phi(\varepsilon\|B\|_T))\}| \leq R' \exp(- R/\varepsilon^2).$$

La démonstration du Théorème (4.2) montre que : $I_\varepsilon = \exp(\frac{i}{\varepsilon^2} S)\, \chi_\varepsilon(t)$ où S est donnée par (4.15) et

(4.19) $$\chi_\varepsilon(t) = f(x + \sqrt{i}\, \varepsilon B_t + \gamma_t) \exp(i \int_0^1 (1-v)dv\, D^2F(v\, \varepsilon B + \gamma/\sqrt{i})B^2).$$

Si $\varepsilon\|B\|_T \leq 2C$, on voit qu'il existe $C' > 0$ telle que

$$|\exp(i \int_0^1 (1-v)dv\, D^2F(v\, \varepsilon B + \gamma/\sqrt{i})B^2)| \leq \exp(C' \|B\|_t^2)$$

Soit $t < \frac{1}{2C'}$, $t \in [0,\tau]$. En utilisant le Lemme 1 de [6], on voit, grâce au Théorème de dérivation sous le signe somme, que

(4.20) $g(\varepsilon) = E\{\chi_\varepsilon(t)\, \phi(\varepsilon\|B\|_T)\}$ est de classe C^∞ en ε et, puisque $\phi \equiv 1$ sur $[0,C]$, on a, pour tout $k \in \mathbb{N}$

(4.21) $$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial\varepsilon^k} g(\varepsilon)/_{\varepsilon=0} = E\{a_k\} \\ \text{avec } a_k = \frac{\partial}{\partial\varepsilon^k}\, \chi_\varepsilon^{(t)}/_{\varepsilon=0}. \end{cases}$$

La loi du mouvement Brownien $B = (B_t)_{t\in[0,T]}$ étant identique à la loi de $-B$, on voit que la fonction g définie par (4.20) est paire, donc $E\{a_k\}=0$ si k est impair. Pour $T_K\in]0,\frac{1}{2C'}\wedge\tau[$, on obtient donc le développement (valable pour t,x fixés avec $0\leq t\leq T_K$, $x\in K$)

$$\psi(t,x) = \exp(\frac{i}{\varepsilon^2}S)\ \{b_0 + b_1\varepsilon^2 + \ldots + b_N\varepsilon^{2N} + o(\varepsilon^{2N})\} \qquad \text{quand } \varepsilon\to 0$$

avec $S = S^{\gamma^{(t,x)}}(t,x)$ donné par (4.15) et

$$(4.22) \qquad b_k = \frac{1}{(2k)!}g^{(2k)}(0) = \frac{1}{(2k)!}E\{a_{2k}\} \qquad (k\in\mathbb{N}).$$

Il est clair que les v.a. a_k s'écrivent $a_k = a_k(t,x) = \pi_k(B)\exp(Q(B))$ où Q est la forme quadratique définie en (4.16) et π_k, une somme finie de formes multilinéaires sur $\mathcal{C}([0,t],\mathbb{R}^n)$, (appelées ici polynômes comme dans [3]) d'ordre $\leq k$ et de même parité que k. Le Théorème (4.13) est donc démontré.

Remarquons, de plus, que par des méthodes analytiques, il est possible d'obtenir un calcul effectif des constantes b_k.

La Proposition (4.27) suivante montre qu'on peut souvent remplacer le développement asymptotique $\{b_0 + b_1h + \ldots + b_N h^N + o(h^N)\}, h\to 0$ figurant dans l'égalité (4.14) par une fonction de classe C^∞ en h.

Soit $t\in]0,T]$ et $\Omega_t = \{\omega\in\mathcal{C}([0,t],\mathbb{R}^n)$ tels que $\omega(0)=0\}$

On dira que $\gamma\in\Omega_t$ vérifie la propriété $(\mathfrak{P})$ si, pour tout $\omega\in\Omega_t$, on a :

$$(4.23) \qquad -\left[\operatorname{Im} D^2F(\omega+\gamma/\sqrt{i})\omega^2\right] \leq c\,\|\omega\|_t^2$$

où $c\in\mathbb{R}$, $c<\frac{1}{t}$ et où F est donnée par (2.1) :

$$\operatorname{Im}\left[D^2F(\omega+\gamma/\sqrt{i})\omega^2\right] = \mathcal{R}e(D^2s)(x+\sqrt{i}\ \omega_t+\gamma_t)\omega_t^2 - \int_0^t \mathcal{R}e(D^2V)(x+\sqrt{i}\ \omega_u+\gamma_u)\omega_u^2\,du$$

$\mathcal{R}e(D^2s(y))$ et $\mathcal{R}e(D^2V(y))$ étant les matrices réelles symétriques $n\times n$:

$$\mathcal{R}e\left(\frac{\partial^2 s}{\partial y_\ell\partial y_k}(y)\right)_{\ell,k=1,\ldots,n}, \quad \mathcal{R}e\left(\frac{\partial^2 V}{\partial y_\ell\partial y_k}(y)\right)_{\ell,k=1,\ldots,n}$$

(4.24) Lemme :

Soit $(t,x) \in]0,T] \times W$. Sous les hypothèses (1.1) et (1.2), il existe au plus une solution $\gamma = (\gamma_u^{(t,x)})_{u \in [0,t]}$ du problème (4.1) vérifiant la propriété $(\mathcal{P})$ et, pour un tel chemin, si $(\psi(t,x))$ désigne la solution du problème (0.1) (0.2) donnée par le Théorème (1.3), on a :

$$\psi(t,x) = \exp(\frac{i}{h} S^\gamma(t,x))\, H_{(t,x)}(h) \tag{4.25}$$

où $S^\gamma(t,x) = \frac{1}{2}\int_0^t |\dot\gamma_u|^2 du - \int_0^t V(x+\gamma_u)du + s(x+\gamma_t)$ et où $H_{(t,x)}(h)$ est une fonction continue en h, de classe C^∞ si, par exemple, la donnée initiale s est à croissance exponentielle dans l'ouvert D.

Preuve : On utilise la représentation (4.3) de $\psi(t,x)$, le Lemme 1 de [6] et le Théorème de convergence dominée pour montrer que la fonction $H_{(t,x)}(h)$ est continue en h, de classe C^∞ si s est à croissance exponentielle.

Notons $\psi_h^1(t,x)$ (resp. $\psi_h^f(t,x)$) la solution de (0.1), (0.2) lorsque la donnée initiale est $\exp(\frac{i}{h} s(x))$ (resp $f(x) \exp(\frac{i}{h} s(x))$.

Si γ vérifie la propriété $(\mathcal{D})$, on a :

$$\lim_{h\to 0} \frac{\psi_h^f(t,x)}{\psi_h^1(t,x)} = f(x+\gamma_t^{(t,x)}) \tag{4.26}$$

En faisant varier f, on voit que la valeur finale de $(\gamma_u^{(t,x)})_{u\in[0,t]}$: $\gamma_t^{(t,x)}$ est déterminée de manière unique, donc que γ est aussi déterminée de manière unique.

(4.27) Proposition :

Supposons qu'il existe deux fonctions localement bornées δ_1 et δ_2 de W dans $\mathbb{R}$ telles que, pour tout $(y,z) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n$ et tout $x \in W$ on ait :

(4.28)
$$\begin{cases} \text{i)} \ \mathcal{R}e\, D^2V(x+\sqrt{i}\,y)z^2 \leq \delta_1(x)\,\|z\|^2 \\ \text{ii)} -\mathcal{R}e\, D^2s(x+\sqrt{i}\,y)z^2 \leq \delta_2(x)\,\|z\|^2. \end{cases}$$

Si K est un compact de W, il existe nombre $T_K \in]0,T]$ tel que, pour tout $t \in [0,T_K]$ $x \in K$, la solution $\gamma^{(t,x)}$ du problème (4.1), donnée par la formule (4.12), vérifie la propriété $(\mathcal{P})$.

Sous les hypothèses (1.1) et (1.2), la représentation (4.25) de la solution $(\psi(t,x))$ de l'équation de Schrödinger est alors valable, pour tout $t \in [0,T_K], x \in K$.

Preuve : Soit K un compact de W. Il existe un ouvert borné G et $\in]0,T]$ tels que $x + \gamma_u^{(t,x)} \in G$, pour tout $x \in K$, $t \in [0,\tau]$ et $u \in [0,t]$, avec $\overline{G} \subsetneq W$. On voit alors facilement, par un argument de compacité, que, pour tout t assez petit, le chemin $\gamma^{(t,x)}$ vérifie la propriété $(\mathcal{P})$, uniformément en $x \in K$.

(4.29) Exemples :

On suppose que les données initiales f,s vérifient (1.1) et que, pour tout $(x,y) \in W \times \mathbb{R}^n$

$$-\operatorname{Im} s(x+\sqrt{i}\,y) \leq \alpha_1(x) + \alpha_2(x)\,\|y\|^2$$

$$|f(x+\sqrt{i}\,y)| \leq \exp(\beta_1(x) + \beta_2(x)\,\|y\|^2)$$

où α_1, α_2, β_1, β_2 sont des fonctions continues de W dans $\mathbb{R}$ avec $\alpha_2(x) + 2h\,\beta_2(x) < \frac{1}{2T}$.

Alors les hypothèses (1.1) et (1.2) sont vérifiées pour le triplet (V,f,s) lorsque le potentiel V est de la forme :

1) V est un polynôme : $V(x) = a_o + a_1 x + \ldots + a_d\, x^d$ $(x \in \mathbb{R}^n)$ où a_m $(0 \leq m \leq d)$ est une application multilinéaire symétrique de $(\mathbb{C}^n)^m$ dans $\mathbb{C}$ telle que $a_m((\mathbb{R}^n)^m) \subseteq \mathbb{R}$ à condition que $d^oV = 1$ ou bien que $d^oV = d = 2+4p$ $(p \in \mathbb{N})$ et

$$\begin{cases} (-1)^p\, a_d\, x^d < 0 & \text{pour tout } x \in \mathbb{R}^n \text{ quand } p \geq 1 \\ a_2\, x^2 < c\, \|x\|^2 & \text{quand } p = 0 \text{ (avec } cT + \alpha_2 + 2h\, \beta_2 < \frac{1}{2T}). \end{cases}$$

2) $V(x) = \dfrac{k}{|<\ell,x>+\ell'|^r}$, où $r > 0$, $k, \ell' \in \mathbb{R}$, $\ell \in \mathbb{R}^n - \{0\}$ sont fixés et où x appartient à l'ouvert $W = \{x \in \mathbb{R}^n$ tels que $<\ell,x> + \ell' \neq 0\}$ avec

$<\ell,x> = \sum_{j=1}^{n} \ell_j\, x_j$ (Cf. la Proposition 4 de [6]).

3) $V(x) = \dfrac{k}{(\sin(<\ell,x>+\ell'))^r}$, $k \in \mathbb{R}$, $r \in \mathbb{N}$, $x \in W$ et

$W = \{x$ tels que $<\ell,x> + \ell' \neq p\pi$ pour tout $p \in \mathbb{Z}\}$ ou bien

$V(x) = k(tg(<\ell\,,x> + \ell'))^r$ (avec $<\ell,x> + \ell' \neq \pi/2 + p\pi$, pour tout $p \in \mathbb{Z}$) etc....

On vérifie, de plus, que la condition (4.28) i) est satisfaite dans les exemples 2) et 3) et, quand $n = 1$, dans l'exemple 1).

BIBLIOGRAPHY:

[1] S.A. ALBEVERIO, R.J. HØEGH-KROHN:
Oscillatory integrals and the method of stationary phase in infinitely many dimensions, with applications to the classical limit of quantum mechanics. Inventiones Maths. 40, 59-106 (1977).

[2] R. AZENCOTT:
Grandes déviations et applications. Saint-Flour VIII. Lecture Notes Math. 774. Springer-Verlag 1980.

[3] R. AZENCOTT:
Formule de Taylor stochastique et développement asymptotique d'intégrales de Feymann. Lecture Notes Math. 921. Séminaire de Probabilités XVI. Springer-Verlag 1982, p. 237-284.

[4] R. AZENCOTT, C. BELLAICHE, H. Doss:
(A paraître).

[5] C. DE WITT-MORETTE, A. MAHESHWARI, B. NELSON:
Path integration in non-relativistic quantum mechanics. Physics Reports, 50 (1979) p. 255-372.

[6] H. DOSS:
Sur une résolution stochastique de l'equation de Schrödinger à coefficients analytiques. Comm.Math.Phys. 73, 247-264 (1980).

[7] H. DOSS:
Quelques formules asymptotiques pour les petites perturbations de systèmes dynamiques. Ann.Inst. Henri Poincaré, Vol. XVI, no. 1, 1980, p. 17-28.

[8] K.D. ELWORTHY, A.J. TRUMAN:
Classical mechanics, the diffusion (heat) equation and the Schrödinger equation on Riemannian manifolds. Reprint.

[9] V.P. MASLOV:
Théorie des perturbations et méthodes asymptotiques. Paris, Dunod (1972).

[10] M. SCHILDER:
Some asymptotic formulas for Wiener integrals. Trans. Am. Math. Soc. 125, 63-85 (1966).

[11] A. TRUMAN:
Classical mechanics, the diffusion (heat) equation and the Schrödinger equation. J. Math. Phys. 18 (1977), 2308-15.

[12] A.D. VENTSEL, M.J. FREIDLIN:
On small random perturbations of dynamical systems. Russian Math. surveys, Vol. XXV, 1970 p. 1-55.