



HAL
open science

Métastabilité dans les systèmes avec lois de conservation

Sébastien Dutercq

► **To cite this version:**

Sébastien Dutercq. Métastabilité dans les systèmes avec lois de conservation. Théorie spectrale [math.SP]. Université d'Orléans, 2015. Français. NNT : 2015ORLE2016 . tel-01280459

HAL Id: tel-01280459

<https://theses.hal.science/tel-01280459>

Submitted on 29 Feb 2016

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

***ÉCOLE DOCTORALE MATHÉMATIQUES,
INFORMATIQUE, PHYSIQUE THÉORIQUE ET
INGÉNIERIE DES SYSTÈMES (MIPTIS)***

LABORATOIRE : MAPMO

THÈSE présentée par :

Sébastien DUTERCQ

soutenue le : **22-06-2015**

pour obtenir le grade de : **Docteur de l'université d'Orléans**

Discipline : **Mathématiques**

**Métastabilité dans les systèmes
avec lois de conservation**

THÈSE dirigée par :

Nils BERGLUND

Professeur, Université d'Orléans

RAPPORTEURS :

**Frank den HOLLANDER
Eric VANDEN-EIJNDEN**

Professeur, Université de Leiden
Professeur, Université de New York

JURY :

Claude-Alain PILLET

Professeur, Université de Toulon, Président
du jury

**Romain ABRAHAM
Nils BERGLUND
Bastien FERNANDEZ**

Professeur, Université d'Orléans
Professeur, Université d'Orléans
Directeur de recherche, CNRS, Université
Aix-Marseille

**Frank den HOLLANDER
Marc PEIGNÉ
Eric VANDEN-EIJNDEN**

Professeur, Université de Leiden
Professeur, Université de Tours
Professeur, Université de New York

Remerciements

Tout d'abord, je tiens à exprimer mon profond respect et ma grande reconnaissance au professeur Nils BERGLUND, mon directeur de thèse, qui m'a proposé un sujet de recherche très intéressant, m'a initié à la recherche et a encadré mes travaux. Je le remercie pour les nombreuses connaissances qu'il m'a transmises ainsi que pour sa patience, sa bonne humeur et son investissement.

Mes remerciements s'adressent également aux professeurs Frank den HOLLANDER et Eric VANDEN-EIJNDEN, d'avoir accepté la tâche de rapporteurs de cette thèse.

Je souhaite aussi remercier les membres du jury Romain ABRAHAM, Bastien FERNANDEZ, Marc PEIGNÉ et Claude-Alain PILLET.

Mes remerciements vont à l'égard des membres du laboratoire MAPMO de l'université d'Orléans pour leur accueil sympathique, les conditions de travail, et pour toutes les discussions pendant ces années de thèse, de master et de licence. Impossible d'oublier mes amis thésards, avec eux, j'ai vécu de bons et agréables moments, qui ont égayé mes journées de travail. A tous, je souhaite une bonne réussite et une bonne continuation.

Une mention particulière va à ma famille. Ma tendre femme Anaïs pour son inconditionnel soutien, mes chers parents Stéphane et Malika grâce à qui j'ai pu faire toutes ces études, mais aussi mes soeurs Angélique et Gaëlle, mes beaux-parents Daniel et Nicole, mon beau frère Nicolas et sa compagne Laetitia, mon oncle André et sa femme Claudine, mon oncle Serge, mon cousin Wilfried, ma cousine Tatiana et tous ceux auxquels je tiens. Je veux leur témoigner toute ma gratitude et mon immense reconnaissance pour leur soutien et encouragements constants et pour avoir toujours cru en moi tout le long de ces années.

Enfin, et pour être sur de n'oublier personne, je remercie également tous ceux qui m'ont apporté leur aide.

Sébastien DUTERCQ

Table des matières

1	Introduction	7
1.1	Métastabilité	7
1.2	Diffusions	9
1.3	Contenu de la thèse	14
2	Étude de V_γ : dimension 2, 3 et 4	17
2.1	Transformée de Fourier Discrète	19
2.2	Cas $N = 2$	25
2.2.1	Résultats	25
2.2.2	Recherche des points critiques	26
2.2.3	Étude de l'indice des selles	26
2.2.4	Étude des liaisons	27
2.3	Cas $N = 3$	27
2.3.1	Résultats	27
2.3.2	Recherche des points critiques	27
2.3.3	Étude des indices de selle	28
2.3.4	Conclusion	28
2.4	Cas $N = 4$	29
2.4.1	Résultats	29
2.4.2	Recherche des points critiques	30
2.4.3	Étude des indices de selle	32
2.4.4	Étude des liaisons	35
3	Étude de V_γ : dimension quelconque	37
3.1	Recherche des selles d'indice 0 et 1	37
3.1.1	Cas $\gamma = 0$	37
3.1.2	Cas $\gamma > 0$	43
3.2	Recherche des liaisons	46
3.2.1	Étude des chemins	46
3.2.2	Début de hiérarchie à l'ordre dominant	50
3.2.3	Hiérarchie plus fine sur B_1	53
3.3	Cas $N = 8$	62
4	Processus de saut markovien	63
4.1	Définitions	63
4.1.1	Cas asymétrique et résultats	64
4.1.2	Algorithme asymétrique	66
4.1.3	Cas symétrique	68
4.2	Les résultats	70
4.2.1	La représentation triviale	70
4.2.2	Autre représentation irréductible de dimension 1	71
4.2.3	Représentation irréductible de dimension 2 ou plus	72
4.2.4	Trou Spectral	74

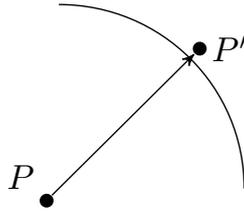
4.3	Les démonstrations	76
4.3.1	Théorie des groupes	76
4.3.2	Estimation des valeurs propres	79
4.3.3	Espérance de temps d'atteinte	85
4.4	Retour sur le cas de la dimension 4	87
4.5	Retour sur le cas de la dimension 8	89
5	Processus de diffusion	94
5.1	Éléments de la théorie du potentiel	95
5.1.1	Définitions et interprétations probabilistes	95
5.1.2	Résultats	99
5.2	Éléments du cas symétrique	101
5.2.1	Estimations spectrales	101
5.2.2	Stratégie générale	105
5.2.3	Matrice de capacité	106
5.3	Cas d'une orbite	118
5.4	Applications au cas $N = 4$	128
A	Représentation des groupes finis	130
A.1	Représentation	130
A.1.1	Généralités	130
A.1.2	Représentations irréductibles	131
A.1.3	Somme directe de représentations	131
A.1.4	Opérateur d'entrelacement et lemme de Schur	132
A.2	Caractères et relations d'orthogonalité	133
A.2.1	Fonctions sur un groupe, coefficients matriciels	133
A.2.2	Caractère d'une représentation	134
A.2.3	Produit tensoriel et caractère	134
A.2.4	Relation d'orthogonalité	136
A.2.5	Table de caractères	138
A.2.6	Décomposition des représentations	138
A.3	La représentation régulière	139
A.3.1	Définition et caractère	139
A.3.2	Décomposition en composantes isotypiques	140
A.3.3	Base de l'espace vectoriel des fonctions centrales	140
A.4	Produit deux groupes et représentations	141
A.5	Opérateurs de projection	142
A.6	Exemples de table de caractères	143
A.6.1	Table de $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$	143
A.6.2	Table de D_n	143
A.6.3	Table de $D_n \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$	144

Chapitre 1

Introduction

1.1 Métastabilité

Pour commencer ce mémoire, avant de parler directement de l'aspect mathématique, nous allons expliquer le principe physicochimique qu'est la métastabilité. Pour ce faire nous allons utiliser un article de F. den Hollander [13] qui explique le phénomène qui nous concerne de manière physicochimique ainsi que mathématique pour le cas de la dimension 2 et 3. Considérons un système thermodynamique en équilibre à un point P dans l'espace des phases (i.e. l'espace des paramètres thermodynamiques tels que : la température, la pression, la densité ou un champ extérieur).

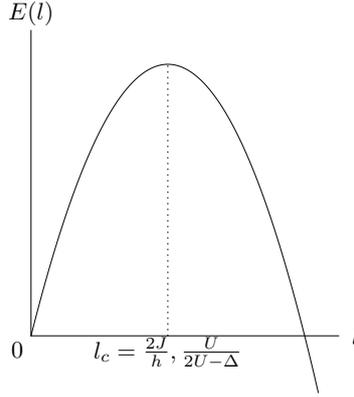


Le point P est d'un côté d'une courbe sur laquelle le système subit une transition de phase de premier ordre (i.e. une transition qui requiert de l'énergie). Supposons que les paramètres soient changés rapidement vers un point P' de l'autre côté de la courbe et proche d'elle (voir image ci-dessus). Alors au lieu de subir la transition de phase rapidement, le système persiste un long moment dans l'ancien équilibre P , maintenant appelé métastable, jusqu'à ce qu'il aille vers l'équilibre P' sous l'influence de fluctuations aléatoires internes ou externes. Vu que le système doit dépasser la barrière d'énergie quand il fait la transition, cela prend du temps pour les fluctuations aléatoires d'achever le franchissement, et plus les paramètres thermodynamiques sont proches de la barrière d'énergie plus le temps sera long afin que le système atteigne l'état d'équilibre.

Un des modèles les plus connus, et aussi l'un des plus simples présentant une transition de phases, est celui d'Ising. Il permet de modéliser, par exemple, des phénomènes de ferromagnétisme ou de gaz sursaturé. Ce modèle consiste à se placer dans une grande boîte Λ de \mathbb{Z}^d (avec condition au bord périodique dans le cas ferromagnétique), et d'associer à chaque site $x \in \Lambda$ un spin, c'est à dire une valeur $\sigma(x) \in \{-1, 1\}$ dans le cas ferromagnétique ou $\sigma(x) \in \{0, 1\}$ dans le cas gaz sursaturé. On appelle configuration de spin un élément $\sigma \in \{-1, 1\}^\Lambda$ ou $\sigma \in \{0, 1\}^\Lambda$. Pour expliquer les transitions entre configuration de spin il nous faut définir l'énergie, qui est donnée par l'Hamiltonien.

Pour le cas ferromagnétique l'Hamiltonien est donné par

$$H(\sigma) = -\frac{J}{2} \sum_{(x,y) \in \Lambda^*} \sigma(x)\sigma(y) - \frac{h}{2} \sum_{x \in \Lambda} \sigma(x), \quad (1.1.1)$$


 FIGURE 1.1. Énergie de la configuration de spin σ_l en fonction de l pour les deux dynamiques

où Λ^* désigne l'ensemble des paires de voisins dans Λ , $J > 0$ est le potentiel de paire ferromagnétique agissant entre les spins voisins et $h \in]0, 2J[$ est le champ magnétique agissant sur un spin.

Pour le cas gaz sursaturé l'Hamiltonien est donné par

$$H(\sigma) = -U \sum_{(x,y) \in \Lambda^*} \sigma(x)\sigma(y) + \Delta \sum_{x \in \Lambda} \sigma(x), \quad (1.1.2)$$

où Λ^* désigne l'ensemble des paires de voisins dans Λ , $U > 0$ est l'énergie de liaison entre les spins voisins et $\Delta \in]U, 2U[$ est l'énergie d'activation d'un spin.

Un algorithme standard pour modéliser les transitions entre deux configurations de spin σ vers σ' est l'algorithme de Métropolis. Les taux de transitions sont donnés par $e^{-\min(H(\sigma')-H(\sigma), 0)/\epsilon}$, pour toutes les configurations de spin σ' atteignables partant de σ , où ϵ est un petit paramètre représentant la température.

Pour le cas ferromagnétique, les configurations de spin σ' atteignables partant de σ sont σ auquel on a juste changé un seul spin, et cela définit une dynamique que l'on appelle dynamique de type Glauber.

Pour le cas gaz sursaturé, les configurations de spin σ' atteignables partant de σ sont σ auquel on a interverti deux spins voisins de Λ ou bien changé la valeur d'un spin du bord $\partial\Lambda$, et cela définit une dynamique que l'on appelle dynamique de type Kawasaki.

Les transitions des dynamiques sont données par $e^{-\min(H(\sigma')-H(\sigma), 0)/\epsilon}$ (avec un Hamiltonien différent), ce qui veut dire que le système aura une probabilité exponentiellement petite de faire croître l'énergie et une grande probabilité de faire diminuer l'énergie. En effet, si on pose

$$n_\sigma = |\{\sigma' \text{ atteignable partant de } \sigma \mid H(\sigma') \leq H(\sigma)\}|, \quad (1.1.3)$$

alors

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^\sigma(H(\sigma') \leq H(\sigma)) &\simeq \frac{1}{n_\sigma} \\ \mathbb{P}^\sigma(H(\sigma') > H(\sigma)) &\simeq \frac{1}{n_\sigma} e^{-(H(\sigma')-H(\sigma))/\epsilon} \end{aligned} \quad (1.1.4)$$

Pour expliquer la transition de phase de ces deux dynamiques prenons les notations suivantes

- σ_{-1} est la configuration de spin dont tous les spins valent -1
- σ_0 est la configuration de spin dont tous les spins valent 0
- σ_1 est la configuration de spin dont tous les spins valent 1

Notons σ_l la configuration de spin ayant un carré de taille $l \times l$ de spins qui valent 1 et le reste des spins qui valent -1 dans le cas ferromagnétique ou 0 dans le cas gaz sursaturé. Par un simple argument de combinatoire, on a que :

- Dans le cas ferromagnétique, l'énergie de σ_l relative à l'énergie de $\sigma_{\underline{1}}$ vaut

$$E(l) = H(\sigma_l) - H(\sigma_{\underline{1}}) = 4Jl - hl^2. \quad (1.1.5)$$

Elle possède un maximum en

$$l_c = \frac{2J}{h}. \quad (1.1.6)$$

- Dans le cas gaz sursaturé, l'énergie de σ_l relative à l'énergie de $\sigma_{\underline{0}}$ vaut

$$E(l) = H(\sigma_l) - H(\sigma_{\underline{0}}) = -2Ul(l-1) + \Delta l^2. \quad (1.1.7)$$

Elle possède un maximum en

$$l_c = \frac{U}{2U - \Delta}. \quad (1.1.8)$$

En représentant l'énergie en fonction de la taille de la gouttelette l , les deux dynamiques ont le même type de graphe (voir la Figure 1.1). On voit qu'après avoir formé une gouttelette de taille l_c le système va aller vers la configuration de spin $\sigma_{\underline{1}}$. En effet, si on considère un $l < l_c$ alors la probabilité transition de σ_l à σ_{l+1} sera d'ordre $e^{-(H(\sigma_{l+1})-H(\sigma_l))/\epsilon}$. Si $l > l_c$, alors la probabilité de transition σ_l à σ_{l+1} sera d'ordre 1. On appellera gouttelette critique la gouttelette de taille l_c .

Ces deux dynamiques ont le même type de transition de phase, c'est à dire que si on part de la configuration de spin $\sigma_{\underline{1}}$ dans le cas ferromagnétique, ou $\sigma_{\underline{0}}$ dans le cas gaz sursaturé, pour atteindre la configuration de spin $\sigma_{\underline{1}}$ le système va devoir créer une gouttelette critique. Une fois que cela arrive, le système ira donc vers la configuration de spin $\sigma_{\underline{1}}$ avec très forte probabilité.

On voit aussi l'effet du paramètre ϵ , qui représente la température, car plus il est proche de 0 plus la probabilité partant de σ_l d'atteindre σ_{l+1} sera petite lorsque $l < l_c$. Cela correspond bien au fait que plus les paramètres thermodynamiques sont proches de la barrière de transition, plus le système met du temps pour arriver à l'état d'équilibre.

1.2 Diffusions

Nous avons donné la définition de ces deux dynamiques pour pouvoir expliquer de manière physicochimique le choix d'un potentiel V , que nous allons définir dans l'Hypothèse 1.2.1, qui nous servira à illustrer notre théorie. Au lieu d'étudier un système avec une dynamique de Métropolis, qui est discrète en espace, nous allons étudier une autre classe de dynamique qui est continue en espace et en temps : celle des diffusions.

Le but de ce mémoire est l'étude de l'équation différentielle stochastique

$$dX_\epsilon(t) = -\nabla V(X_\epsilon(t))dt + \sqrt{2\epsilon}dW(t), \quad (1.2.1)$$

sur un domaine régulier $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, où $dW(t)$ est le mouvement Brownien standard de dimension d et le gradient ∇V est généré par une fonction potentielle $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ suffisamment régulière dans le sens suivant

Hypothèse 1.2.1 ([10], Hypothèses H.1 et ND).

1. $V \in \mathcal{C}^3(\Omega)$ et $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ est un ouvert connexe.
2. Si Ω n'est pas borné alors
 - (a) $\liminf_{x \rightarrow \infty} |\nabla V(x)| = \infty$, et
 - (b) $\liminf_{x \rightarrow \infty} (|\nabla V(x)| - 2\Delta V(x)) = \infty$.
3. L'ensemble $\mathcal{M} = \{x_1, \dots, x_n\}$ des minima locaux de V est fini.
4. La matrice hessienne de V en tout point critique est non dégénérée (i.e. n'a pas 0 comme valeur propre).

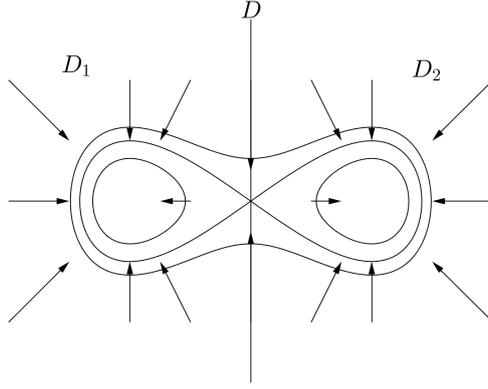


FIGURE 1.2. Exemple d'un potentiel représenté par ses courbes de niveau et son champ de vecteur ∇X . On a deux bassins d'attraction D_1 et D_2 séparés par une droite D qui correspond à la variété stable de la selle.

La première question que l'on peut se poser, après l'explication du principe de métastabilité, est en quoi cette équation différentielle stochastique modélise un tel phénomène.

Si l'on considère l'équation (1.2.1) sans le bruit

$$dX(t) = -\nabla V(X(t))dt, \quad (1.2.2)$$

on a une équation différentielle complètement déterministe. Du fait de l'Hypothèse 1.2.1 sur le potentiel V , on a que presque partout sur Ω la solution $X(t)$ converge vers un minimum local de V car la solution $X(t)$ décroît en terme de potentiel

$$\frac{d}{dt}V(X(t)) = \langle \nabla V(X(t)), \frac{d}{dt}X(t) \rangle = -\|\nabla V(X(t))\|^2 \leq 0. \quad (1.2.3)$$

Cela motive la définition suivante

Définition 1.2.2. On appelle bassin d'attraction de $x_i \in \mathcal{M}$, que l'on notera D_i , l'ensemble des points $y \in \Omega$ tels que la solution de l'équation différentielle (1.2.2), avec pour condition initiale $X(0) = y$, converge vers x_i (voir la Figure 1.2 pour exemple).

Remarque 1.2.3. Avec cette notation et l'Hypothèse 1.2.1 on a alors

$$\mu \left(\left(\bigcup_{i=1}^n D_i \right)^c \right) = 0, \quad (1.2.4)$$

où μ désigne la mesure de Lebesgue.

En rajoutant du bruit, si le processus commence en $x \in D_i$, il va d'abord aller dans un voisinage de x_i avec très forte probabilité, puis au bout d'un certain temps (à cause du bruit) le processus va atteindre un autre D_j et donc avec très forte probabilité aller dans un voisinage de x_j . Ceci est bien un phénomène analogue à celui que nous avons décrit précédemment.

Ce problème est un cas particulier de la classe plus générale des petites perturbations aléatoires des systèmes dynamiques, étudiés depuis le début des années 1970 par Freidlin et Wentzell (voir [16]), utilisant la méthode des grandes déviations. Cependant, la recherche dans ce sujet date de plus longtemps dans la littérature physique et chimique (voir [15, 26]). L'un des livres les plus anciens est celui de Eyring, Glasstone et Laidler (voir [18]), et l'article le plus ancien est celui de Svante Arrhenius introduisant pour la première fois l'exposant d'Arrhenius (voir [1]).

Les questions typiques liées à ce problème sont :

- Quel est le temps nécessaire pour atteindre un minimum a , partant d'un minimum b du potentiel V ?

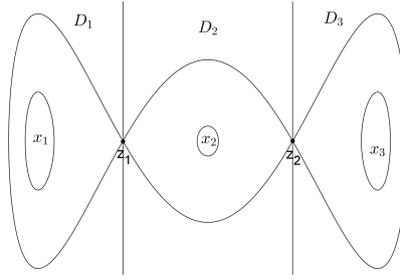


FIGURE 1.3. Exemple d'un potentiel et de ses bassins d'attraction. On a que x_1 et x_2 sont des minima voisins tout comme x_2 et x_3 , mais x_1 et x_3 ne le sont pas.

- Quels sont les chemins empruntés par un tel processus ?
- Quelle est la nature du spectre du générateur de ce processus ?
- Quelles sont les fonctions propres associées aux petites valeurs propres ?

En ce qui concerne la deuxième question on peut entrevoir la réponse de manière plus ou moins heuristique. En effet on a vu que partant d'un minimum local on reste piégé autour de celui-ci avant d'aller vers un autre minimum local puis y rester encore piégé un certain temps. On va vu de plus que, lorsqu'on regarde la dynamique sans le bruit, la solution décroît en terme de potentiel. Alors en rajoutant du bruit, pour aller d'un minimum local à un autre, on aura plutôt tendance à le faire de telle sorte que le niveau potentiel croisse le moins possible. Cela motive donc la définition suivante

Définition 1.2.4 ([10], Définition 1.1). *Pour tout ensemble $A, B \subset \Omega$ on définit la hauteur de la selle entre A et B par*

$$\hat{V}(A, B) = \inf_{\substack{\omega: [0,1] \rightarrow \Omega \\ \omega(0) \in A, \omega(1) \in B}} \sup_{t \in [0,1]} V(\omega(t)), \quad (1.2.5)$$

où ω est un chemin continu de Ω . On note $\mathcal{G}(A, B)$ la courbe de niveau associée à la hauteur $\hat{V}(A, B)$ donnée par

$$\mathcal{G}(A, B) = \{z \in \mathbb{R}^d \mid V(z) = \hat{V}(A, B)\}. \quad (1.2.6)$$

Un chemin ω entre A et B sera dit minimal si il vérifie

$$\sup_{t \in [0,1]} V(\omega(t)) = \hat{V}(A, B). \quad (1.2.7)$$

Notons $\mathcal{P}(A, B)$ l'ensemble des chemins minimaux de A vers B ,

$$\mathcal{P}(A, B) = \{\omega \in \mathcal{C}([0, 1], \Omega) \mid \omega(0) \in A, \omega(1) \in B, \sup_{t \in [0,1]} V(\omega(t)) = \hat{V}(A, B)\}. \quad (1.2.8)$$

Les chemins minimaux sont donc de bons candidats pour répondre à la deuxième question. Quand nous avons expliqué les dynamiques de type Glauber et de type Kawasaki, on a vu que l'on passait d'une configuration de spin σ à une autre configuration de spin atteignable σ' . L'analogie dans le cas continu est qu'une configuration de spin σ correspond à un minimum local et le caractère atteignable peut être traduit à l'aide de chemins entre minima locaux. Nous allons donc définir la notion de minima voisins permettant l'analogie avec le caractère atteignable du cas discret.

Définition 1.2.5. *Soient x_i et x_j deux minima locaux de V . On dira qu'il sont voisins s'il existe un chemin $\omega : [0, 1] \rightarrow \Omega$ tel que $\omega(0) = x_i, \omega(1) = x_j$ et*

$$\text{im } \omega \setminus ((\text{im } \omega \cap D_i) \cup (\text{im } \omega \cap D_j)) \text{ est réduit à un point,} \quad (1.2.9)$$

où $\text{im } \omega$ est l'ensemble image de la fonction ω (voir la Figure 1.3 pour un exemple).

Pour les autres questions, une notion importante qui nous permettra d'y répondre est la notion de point selle.

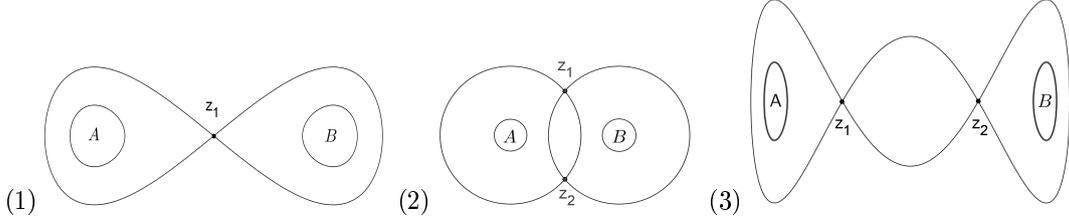


FIGURE 1.4. Exemples de potentiels et portails. (1) $G(A, B) = \{z_1\}$. (2) $G(A, B) = \{z_1, z_2\}$. (3) $G(A, B) = \{z_1\}$ ou $\{z_2\}$.

Définition 1.2.6 ([10], Définition 1.1). *Un portail $G(A, B)$ est un sous ensemble minimal de $\mathcal{G}(A, B)$ avec la propriété que tous les chemins minimaux intersectent $G(A, B)$ (voir Figure 1.4 pour des exemples).*

Remarque 1.2.7. Notons que $G(A, B)$ n'est en général pas unique.

Le résultat qui répond aux trois autres questions, dans le cas où toutes les hauteurs de communications entre minima locaux sont strictement différentes, est le suivant

Théorème 1.2.8 ([9], Théorème 5.1 et [10], Proposition 4.10). *Ordonnons les minima locaux x_1, \dots, x_n tels que pour tout $i \in \{1, \dots, n-1\}$*

$$\hat{V}(x_{i+1}, \mathcal{M}_i) - V(x_{i+1}) < \hat{V}(x_i, \mathcal{M}_{i-1}) - V(x_i), \quad (1.2.10)$$

où $\mathcal{M}_i = \{x_1, \dots, x_i\}$ avec la convention $\mathcal{M}_0 = \emptyset$. Notons $\mathcal{B}_\epsilon(x)$ la boule de rayon ϵ et de centre x

$$\mathcal{B}_\epsilon(x) = \{z \in \mathbb{R}^d \mid \|z - x\|_2 < \epsilon\}. \quad (1.2.11)$$

Posons $\mathcal{S}_k = \bigcup_{i=1}^k \mathcal{B}_\epsilon(x_i)$. Supposons de plus que le portail entre $\mathcal{B}_\epsilon(x_k)$ et \mathcal{S}_{k-1} est réduit à un seul élément s_k^* , c'est à dire

$$G(\mathcal{B}_\epsilon(x_k), \mathcal{S}_{k-1}) = \{s_k^*\}. \quad (1.2.12)$$

Alors $\lambda_1 = 0$ et pour tout $k \in \{2, \dots, n\}$ on a

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \frac{|\lambda_1^*(s_k^*)| \sqrt{\det(\nabla^2 V(x_k))}}{2\pi \sqrt{\det(\nabla^2 V(s_k^*))}} e^{-(\hat{V}(x_k, \mathcal{M}_{k-1}) - V(x_k))/\epsilon} (1 + \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon} |\ln(\epsilon)|^{3/2})) \\ &= \frac{1}{\mathbb{E}^{x_k}(\tau_{\mathcal{S}_{k-1}})} (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})), \end{aligned} \quad (1.2.13)$$

pour un certain $\delta > 0$, où $\tau_{\mathcal{S}_{k-1}}$ est le temps de première atteinte de \mathcal{S}_{k-1} , $\lambda_1^*(s_k^*)$ désigne l'unique valeur propre négative de la matrice hessienne de V au point s_k^* et les λ_k sont les valeurs propres les plus petites du générateur du processus.

Dans ce théorème nous voyons que les éléments s_k^* sont des éléments importants, par la suite on les appellera des selles dont voici la définition générale

Définition 1.2.9 ([10], Définition 1.1). *On définit l'ensemble $\mathcal{S}(A, B)$ des points selles comme l'union de tous les portails $G(A, B)$.*

Remarque 1.2.10. Nous avons énoncé ce théorème dans le cas simple où il n'y a qu'une seule selle mais on peut bien sûr le généraliser dans le cas de plusieurs selles (voir Théorème 5.1 de [9] et Proposition 4.10 de [10]).

Dans le cas d'un potentiel V ayant deux minima locaux x et y possédant une seule selle z , le théorème 1.2.8 donne la formule d'Eyring-Kramers classique (que l'on peut trouver dans [29, 18])

$$\mathbb{E}^x(\tau_{\mathcal{B}_\epsilon(y)}) = \frac{2\pi \sqrt{\det(\nabla^2 V(z))}}{|\lambda_1^*(z)| \sqrt{\det(\nabla^2 V(x))}} e^{(V(z) - V(x))/\epsilon} (1 + \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon} |\ln(\epsilon)|^{3/2})). \quad (1.2.14)$$

Le comportement exponentiel de $e^{(V(z)-V(x))}$ dans (1.2.14) a été suggéré en premier par van t'Hoff, puis justifié physiquement par S. Arrhenius [1]. La formule plus précise avec le préfacteur dépendant des matrices Hessienne a été introduit par Eyring [15] et Kramers [26]. En revanche, les preuves mathématiques sont beaucoup plus récentes. La loi d'Arrhenius a été prouvée en premier par Wentzell and Freidlin, en utilisant la théorie des grandes déviations [38, 39]. La première démonstration rigoureuse de la formule d'Eyring-Kramers (1.2.14) a été donnée par Boiver, Eckhoff, Gayard et Klein en utilisant la théorie du potentiel [9, 10]. Ces méthodes ont aussi été appliquées à des modèles de réseau [8, 13], et utilisées pour étendre la formule d'Eyring-Kramers aux systèmes avec des selles non quadratiques [4] et aux équations différentielles partielles stochastiques [7, 2]. Une autre approche pour démontrer (1.2.14) est l'analyse du Laplacien de Witten agissant sur des p -formes [21, 28], voir par exemple [3] pour des travaux récents.

Dans le cas d'un potentiel V ayant $N > 2$ minima locaux, le Théorème 1.2.8 nous donne les N valeurs propres les plus petites. C'est un fait, qui est connu depuis longtemps, que le générateur admet N valeurs propres exponentiellement petites qui sont liées aux exposants d'Arrhenius $\hat{V}(x_k, \mathcal{M}_{k-1}) - V(x_k)$ et les autres valeurs propres étant plus grandes que $C\epsilon^{d-1}$ [23, 24, 30, 31]. Si N est très grand, il existe des algorithmes permettant de trouver l'ordre des minima locaux vérifiant la condition (1.2.10), dont le cout de calcul est d'ordre $\mathcal{O}(N^2)$, voir par exemple [12].

Le point important dans ce théorème est que toutes les hauteurs de communication entre minima locaux sont strictement différentes pour pouvoir vérifier la condition (1.2.10) du Théorème 1.2.8. Typiquement si V est invariant sous un certain groupe de symétrie non trivial G , la condition (1.2.10) ne pourra pas être vérifiée. Or dans ce mémoire nous ne ferons pas cette hypothèse et donc ce sera la difficulté majeure qu'il faudra traiter pour pouvoir obtenir un résultat analogue à ce théorème. Nous verrons, dans le chapitre 4, que nous allons devoir utiliser la théorie des représentations des groupes finis qui est donné en annexe A (venant de [25] et [36]).

Le terme selle n'est pas choisi de manière anodine car nous pouvons voir que dans le théorème précédent, nous parlons de l'unique valeur propre négative de la matrice hessienne en un minimum local, ce qui nous fait penser à la définition analytique d'un point selle. Rappelons alors la notion de point selle d'un point de vue analytique venant du lemme de Morse (voir [34])

Lemme 1.2.11. *Soit $f \in \mathcal{C}^3(U, \mathbb{R})$ où U est un ouvert de \mathbb{R}^d contenant l'origine. Si 0 est un point critique non dégénéré alors il existe des voisinages V et W de 0 dans \mathbb{R}^d et il existe un changement de variable local (\mathcal{C}^1 -difféomorphisme) $\phi : V \rightarrow W$ tel que $\phi(0) = 0$, et pour tout $x \in V$, si on note u le vecteur $\phi(x)$ on a*

$$f(x) - f(0) = \sum_{i=1}^{d-p} u_i^2 - \sum_{j=d-p+1}^d u_j^2, \quad (1.2.15)$$

où p , que l'on appelle indice du point 0 , est défini par la signature de $(d-p, p)$ de la matrice hessienne f en 0 . Dans le cas $p = 1$ on dira que 0 est un point selle.

Au premier abord, ces deux définitions donnent des objets différents, l'un au sens de la définition 1.2.6 et l'autre d'un point de vue analytique. L'équivalence entre ces deux notions est démontrée dans [4] en introduisant un objet intermédiaire purement topologique.

Définition 1.2.12 ([4], Définition 2.2). *On définit $\mathcal{B}_\rho(z)$ la boule de rayon ρ et de centre z comme dans le théorème 1.2.8. On définit la vallée ouverte et la vallée fermée, que l'on note respectivement $\mathcal{OV}(z)$ et $\mathcal{CV}(z)$ (voir la Figure 1.5 pour des exemples), par*

$$\begin{aligned} \mathcal{OV}(z) &= \{y \in \mathcal{CV}(z) \mid V(y) < V(z)\}, \\ \mathcal{CV}(z) &= \{y \in \mathbb{R}^d \mid \hat{V}(y, z) = V(z)\}. \end{aligned} \quad (1.2.16)$$

Avec ces notations, on dit alors qu'un point selle est un point $z \in \mathbb{R}^d$ tel que il existe $\rho > 0$ pour lequel

1. $\mathcal{OV}(z) \cap \mathcal{B}_\rho(z)$ est non vide et non connexe,
2. $(\mathcal{OV}(z) \cup \{z\}) \cap \mathcal{B}_\rho(z)$ est connexe.

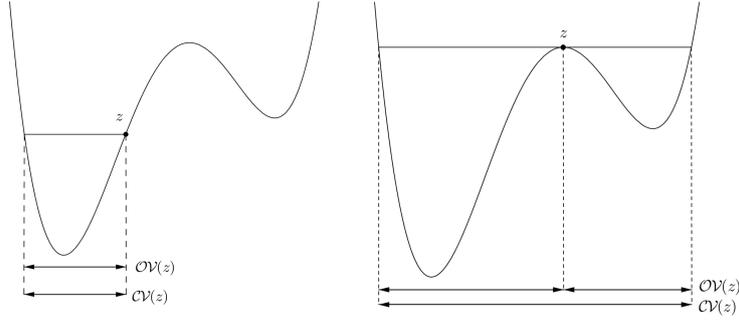


FIGURE 1.5. Exemple d'un potentiel avec les vallées ouvertes et fermées. Dans le deuxième cas, z est une selle.

Les trois propositions qui suivent nous permettent de démontrer l'équivalence entre les deux notions de selle.

Proposition 1.2.13 ([4], Proposition 2.1). *Soit z un point selle (au sens de la Définition 1.2.12). Supposons que $\mathcal{OV}(z)$ n'est pas connexe et soient A et B appartenant à des composantes connexes différentes de $\mathcal{OV}(z)$. Alors $z \in G(A, B)$.*

Proposition 1.2.14 ([4], Proposition 2.2). *Soient A et B deux ensembles disjoints et soit $z \in G(A, B)$. Supposons que z est isolé dans le sens où il existe $\rho > 0$ tel que $\mathcal{B}_\rho^*(z) = \mathcal{B}_\rho(z) \setminus \{z\}$ est disjoint de l'union de tous les portails $G(A, B)$. Alors z est un point selle (au sens de la définition 1.2.12).*

Proposition 1.2.15 ([4], Proposition 2.5). *Supposons que V est de classe \mathcal{C}^2 et soit z un point critique non dégénéré. Alors z est un point selle (au sens de la Définition 1.2.12) si et seulement si la matrice hessienne possède exactement une valeur propre négative (i.e. z est un point selle au sens analytique).*

1.3 Contenu de la thèse

Le potentiel qui nous servira d'illustration tout au long de ce mémoire est le suivant

$$V_\gamma(x) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N x_i^4 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \frac{\gamma}{4} \sum_{i=1}^N (x_{i+1} - x_i)^2 \quad (1.3.1)$$

où $N \in \mathbb{N}$, $x = (x_1, \dots, x_N)$ avec la convention $x_{N+1} = x_1$ (condition au bord périodique) et $\gamma \geq 0$ est l'intensité de couplage.

Remarque 1.3.1. Le potentiel V_γ met en défaut le Théorème 1.2.8, car il est invariant sous le groupe de symétrie G engendré par les trois isométries :

- la permutation $R : x \rightarrow (x_2, \dots, x_N, x_1)$,
- la réflexion $S : x \rightarrow (x_N, \dots, x_1)$,
- le changement de signe $C : x \rightarrow -x$.

Les isométries R et S engendrent le groupe diédral D_N des isométries conservant les polygones réguliers à N côtés, et comme C commute avec R et S , G est le produit direct $D_N \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$.

Donnons tout d'abord la motivation qui nous pousse à considérer ce potentiel dans le cas discret. Pour $\gamma = 0$, on a un potentiel à deux puits indépendants en chaque coordonnée dont l'unique selle est 0 et les minima sont -1 et 1 . On en déduit alors que l'ensemble des points critiques de V_0 est

$$\{-1, 0, 1\}^N. \quad (1.3.2)$$

La matrice Hessienne de V_0 étant diagonale, il est trivial de voir que l'indice d'un point $x \in \{-1, 0, 1\}^N$ est $n_0(x)$ défini par

$$n_0(x) = |\{i \in \llbracket 1, N \rrbracket \mid x_i = 0\}|. \quad (1.3.3)$$

On en déduit que l'ensemble \mathcal{E} des selles (i.e. $n_0 = 1$) de V_0 est l'ensemble des points $x \in \{-1, 0, 1\}^N$ ayant uniquement une coordonnée nulle et l'ensemble \mathcal{X} des minima locaux (i.e. $n_0(x) = 0$) de V_0 est

$$\mathcal{X} = \{-1, 1\}^N \quad (1.3.4)$$

Dans la dynamique discrète, nous considérons uniquement les transitions entre les minima voisins (Définition 1.2.5). En faisant une étude du potentiel V_0 on arrive à montrer que deux minima locaux x et y de V_0 sont voisins si et seulement ils diffèrent uniquement d'une coordonnée.

Pour une petite intensité de couplage $0 < \gamma \ll 1$, nous savons que l'indice des points critiques ne change pas grâce au résultat suivant

Proposition 1.3.2 ([5], Proposition 2.1). *Pour tout N il existe une intensité de couplage critique, que l'on note $\gamma^*(N)$, telle que pour tout $0 < \gamma < \gamma^*(N)$ les points critiques dépendent continument de γ sans changer d'indice.*

Comme les points critiques de V_γ sont de la forme $x(\gamma) = x(0) + \mathcal{O}(\gamma)$ où $x(0) \in \{-1, 0, 1\}^N$ on en déduit que

$$V_\gamma(x(\gamma)) = V_0(x(0)) + \frac{\gamma}{4} \sum_{i=1}^N (x_{i+1}(0) - x_i(0))^2 + \mathcal{O}(\gamma^2). \quad (1.3.5)$$

En définissant le nombre d'interface $I(x)$ d'un point $x \in \{-1, 1\}^N$ par

$$I(x) = |\{i \in \llbracket 1, N \rrbracket \mid x_{i+1} \neq x_i\}|, \quad (1.3.6)$$

on observe qu'à l'ordre 1 en γ , en raison de l'intensité de couplage, le potentiel dépend du nombre d'interfaces et est semblable à l'Hamiltonien 1.1.2 dans le cas ferromagnétique.

La dynamique correspond essentiellement à un modèle d'Ising avec une dynamique de type Glauber (le cas ferromagnétique) avec les correspondances suivantes :

- les coordonnées des minima locaux correspondent aux spins,
- les minima locaux correspondent aux configurations de spins,
- V_γ correspond à l'Hamiltonien,
- $V_0(x(0))$ correspond à $-\frac{h}{2} \sum_{x \in \Lambda} \sigma(x)$,
- $\frac{\gamma}{4} \sum_{i=1}^N (x_{i+1}(0) - x_i(0))^2$ correspond à $-\frac{J}{2} \sum_{(x,y) \in \Lambda^*} \sigma(x)\sigma(y)$,
- deux minima locaux x et y de V_0 sont voisins si et seulement ils diffèrent uniquement d'une coordonnée, correspond à la dynamique de type Glauber.

Ce potentiel étant déjà très largement étudié (voir par exemple [5, 6]), nous allons le modifier en ajoutant une loi de conservation et c'est cela qui fera la particularité de cette thèse. Cette loi est la contrainte suivante

$$\sum_{i=1}^N x_i = 0. \quad (1.3.7)$$

Nous avons vu que, sans la loi de conservation, les transitions entre minima locaux se font en changeant une des coordonnées en son opposé. Alors avec la loi de conservation, lorsqu'une des coordonnées change en son opposé alors une autre coordonnée doit compenser et elle doit aussi changer en son opposé, c'est à dire que deux coordonnées permutent leurs valeurs. Ceci est la motivation de la loi de conservation, car on obtiendra une dynamique de type Kawasaki.

Remarque 1.3.3. Nous pouvons représenter le processus, dans le cas où N pair, par un collier de N sites avec $\frac{N}{2}$ particules et les minima -1 et 1 correspondent respectivement à l'absence et la présence d'une particule en un site.

Remarquons que ce raisonnement, qui nous permet de faire la relation avec une dynamique de type Kawasaki, est heuristique. En effet nous verrons dans les chapitres 2 et 3, que l'étude des minima locaux et des selles de V_γ , ainsi que les transitions, sont plus complexes avec la loi de conservation.

Maintenant que nous avons donné les motivations sur le potentiel V_γ avec la loi de conservation, nous pouvons donner la structure des chapitres qui vont suivre

- Un point important que nous avons vu lors de l'étude de la dynamique, est la recherche des minima locaux et des selles de V_γ ainsi que les minima locaux voisins. Nous commencerons l'analyse, dans le chapitre 2, par le cas des petites dimensions où nous donnerons explicitement ces éléments à l'aide d'une transformée de Fourier discrète. Puis nous continuerons l'analyse, dans le chapitre 3, avec le cas de la dimension quelconque. Nous donnerons, dans un premier temps, une expression explicite de ces éléments dans le cas $\gamma = 0$. Puis, dans un deuxième temps, nous donnerons un développement limité de ces éléments pour γ petit et nous démontrerons aussi l'équivalent de la proposition 1.3.2 pour obtenir que la dynamique reste la même pour γ petit.
- En mathématique, quand on a quelque chose de continu, il est très fréquent de le discrétiser, car souvent les résultats du cas discret sont proches de ceux du cas continu. Nous avons une équation différentielle stochastique à étudier, qui est continue en espace et temps, donc dans un premier temps nous allons discrétiser en espace. C'est à dire considérer le cas d'un processus de saut Markovien, dans le chapitre 4, et de répondre aux questions typiques énoncées précédemment pour ce processus en utilisant la théorie des représentations des groupes finis.
- Puis pour terminer, dans le dernier chapitre, nous étudierons l'équation différentielle stochastique, et nous verrons que les résultats du processus de saut Markovien sont bien une bonne estimation du cas continu.

Chapitre 2

Étude de V_γ : dimension 2, 3 et 4

Dans ce chapitre, nous allons étudier le potentiel pour des petites dimensions. Nous définirons tout d'abord la dynamique de notre système. Puis nous chercherons les points critiques ainsi que leur indice de selle, à l'aide d'un changement de variables.

Soit $N \in \mathbb{N}$, posons $x = (x_1, \dots, x_N)$ et $\gamma \geq 0$. Nous voulons étudier le potentiel

$$V_\gamma(x) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N x_i^4 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \frac{\gamma}{4} \sum_{i=1}^N (x_{i+1} - x_i)^2, \quad (2.0.1)$$

sous la contrainte $\sum_{i=1}^N x_i = 0$. On notera le sous-espace vectoriel associé

$$S = \left\{ x \in \mathbb{R}^N \mid \sum_{i=1}^N x_i = 0 \right\}. \quad (2.0.2)$$

La première chose à faire est de définir la dynamique de notre système. Nous voudrions une dynamique de type gradient, si nous n'avions pas la contrainte alors cette dynamique serait tout simplement

$$\dot{x} = -\nabla V(x). \quad (2.0.3)$$

Pour prendre en compte la contrainte, nous allons considérer une bijection h définie de D (un espace vectoriel de dimension $N - 1$) dans S (cela est bien possible car S est aussi de dimension $N - 1$). Cela va alors nous induire une fonction \tilde{V} par

$$\forall y \in D, \tilde{V}(y) = V(h(y)) \quad (2.0.4)$$

et on définira alors notre dynamique de type gradient par

$$\dot{y} = -\nabla \tilde{V}(y) \quad (2.0.5)$$

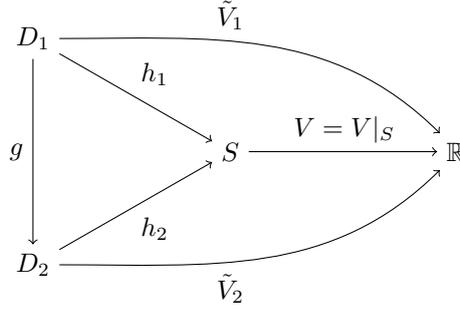
Ainsi notre dynamique de type gradient avec la contrainte est bien définie. En effet

Proposition 2.0.4. *Cette définition de dynamique est intrinsèque, c'est à dire que tout changement de variable isométrique conduit à une dynamique équivalente.*

Démonstration. Soient D_1, D_2 des espaces vectoriels de dimension $N - 1$, h_2 une bijection de D_2 dans S , g un changement de variable isométrique de D_1 dans D_2 . On induit alors la fonction h_1 par

$$h_1 = h_2 \circ g$$

et les fonctions \tilde{V}_1 et \tilde{V}_2 comme dans (2.0.4). Ce qui nous donne le graphe de fonctions suivant



Notons par $w_1 = (u_1, \dots, u_{N-1})$ les éléments de D_1 et $w_2 = (v_1, \dots, v_{N-1})$ les éléments de D_2 (remarquons que $w_2 = g(w_1)$). Pour montrer le caractère intrinsèque, il faut démontrer que

$$\dot{w}_2 = \dot{w}_1 {}^t J_g \quad (2.0.6)$$

où J_g est la matrice Jacobienne de la fonction g .

Remarquons que l'on a la transposée de J_g car nous voyons \dot{w}_2 et \dot{w}_1 comme des vecteurs lignes. Si on les voyait comme des vecteurs colonnes, alors il suffirait d'invertir \dot{w}_1 et J_g et d'enlever la transposée.

On sait par définition que

$$\dot{w}_2 = -\nabla \tilde{V}_2(y_2) \quad (2.0.7)$$

En utilisant la formule de changement de variable dans les calculs des dérivées partielles, pour $j \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket$, on a

$$\frac{\partial \tilde{V}_2}{\partial v_j}(y_2) = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{\partial \tilde{V}_1}{\partial u_i}(y_1) \frac{\partial u_i}{\partial v_j}(y_2)$$

Comme g est un changement de variable isométrique, c'est une application linéaire. Donc pour tout y_2 , $\frac{\partial u_i}{\partial v_j}(y_2)$ est constant et de plus on a l'égalité matricielle

$$\left[\frac{\partial u_i}{\partial v_j}(y_2) \right] = J_{g^{-1}} \quad (2.0.8)$$

Et comme g est isométrique alors

$$J_{g^{-1}} = {}^t J_g \quad (2.0.9)$$

En utilisant les relations (2.0.7), (2.0.8) et (2.0.9), on obtient donc la relation (2.0.6) voulue. \square

Exemple 2.0.5. Si on considère la fonction h suivante :

$$h : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^{N-1} & \rightarrow & S \\ \tilde{x} = (x_1, \dots, x_{N-1}) & \mapsto & (x_1, \dots, x_{N-1}, -x_1 - \dots - x_{N-1}) \end{array} \quad (2.0.10)$$

alors la fonction induite \tilde{V} est :

$$\begin{aligned} \tilde{V}_\gamma(\tilde{x}) &= \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{N-1} x_i^4 + \frac{1}{4} \left(\sum_{i=1}^{N-1} x_i \right)^4 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{N-1} x_i^2 - \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^{N-1} x_i \right)^2 \\ &+ \frac{\gamma}{4} \sum_{i=1}^{N-2} (x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{\gamma}{4} \left(x_1 + \sum_{i=1}^{N-1} x_i \right)^2 + \frac{\gamma}{4} \left(x_{N-1} + \sum_{i=1}^{N-1} x_i \right)^2 \end{aligned} \quad (2.0.11)$$

Pour trouver les points critiques, nous allons donc introduire dans la sous-section suivante un changement de variable (Transformée de Fourier discrète) permettant de simplifier la résolution des systèmes d'équation pour les petites dimensions. Mais nous verrons que ce changement de variables est une isométrie de \mathbb{R}^N dans un sous-espace de \mathbb{C}^N mais ne l'est pas avec la contrainte.

Puis on donnera l'écriture de la matrice hessienne en fonction des coordonnées de Fourier pour calculer les valeurs propres de la matrice hessienne, afin de connaître l'indice de selle de ces points critiques.

2.1 Transformée de Fourier Discrète

Tout d'abord définissons la transformée de Fourier discrète utilisée :

Définition 2.1.1. Posons $\omega = e^{\frac{2i\pi}{N}}$. Pour $k \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket$ posons

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \omega^{jk} x_j \quad (2.1.1)$$

ainsi que l'application associée

$$\mathcal{F} : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^N & \rightarrow & \mathbb{C}^N \\ x = (x_1, \dots, x_N) & \mapsto & y = (y_0, \dots, y_{N-1}) \end{array} \quad (2.1.2)$$

Proposition 2.1.2. L'application \mathcal{F} définie dans (2.1.2) est une isométrie de \mathbb{R}^N dans \mathbb{C}^N munis des produits scalaires usuels.

Démonstration. Soient $x, x' \in \mathbb{R}^N$. On a

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{F}(x), \mathcal{F}(x') \rangle_{\mathbb{C}^N} &= \langle (y_0, \dots, y_{N-1}), (y'_0, \dots, y'_{N-1}) \rangle_{\mathbb{C}^N} = \sum_{i=0}^{N-1} y_i \overline{y'_i} \\ &= \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N \omega^{ij} x_j \right) \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^N \overline{\omega^{ik}} x'_k \right) \\ &= \frac{1}{N} \sum_{j,k \in \llbracket 1, N \rrbracket} x_j x'_k \sum_{i=0}^{N-1} \omega^{i(j-k)} = \frac{1}{N} \sum_{j,k \in \llbracket 1, N \rrbracket} x_j x'_k N \delta_{j,k} \\ &= \sum_{j=1}^N x_j x'_j = \langle x, x' \rangle_{\mathbb{R}^N} \end{aligned}$$

□

Remarque 2.1.3. On peut définir y_N par la formule (2.1.1) et voir que $y_N = y_0$. De manière générale, on peut définir y_k , pour $k \in \mathbb{Z}$, et voir que $y_k = y_{k+N}$.

Remarque 2.1.4. Pour tout $k \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket$ on a $\overline{y_k} = y_{N-k}$.

Remarque 2.1.5. $y_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{i=1}^N x_i$ donc la contrainte est équivalente à $y_0 = 0$. De plus avec la contrainte, on a pour $k \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket$

$$y_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^{N-1} (\omega^{jk} - 1) x_j. \quad (2.1.3)$$

Du fait de cette remarque on obtient la définition qui suit

Définition 2.1.6. On notera $\tilde{y} = (y_1, \dots, y_{N-1})$ et on l'appellera les coordonnées de Fourier de $\tilde{x} \in S$.

Remarque 2.1.7. Avec les notations utilisées dans l'introduction de ce chapitre, on a :

$$\begin{aligned} h : \begin{array}{ccc} D_1 = \mathbb{R}^{N-1} & \rightarrow & S \\ \tilde{x} = (x_1, \dots, x_{N-1}) & \mapsto & (x_1, \dots, x_{N-1}, -x_1 - \dots - x_{N-1}) \end{array} \\ g = \tilde{\mathcal{F}} : \begin{array}{ccc} D_1 = \mathbb{R}^{N-1} & \rightarrow & D_2 \\ \tilde{x} = (x_1, \dots, x_{N-1}) & \mapsto & y = (y_1, \dots, y_{N-1}) \end{array} \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

où

$$D_2 = \left\{ z = (z_1, \dots, z_{N-1}) \in \mathbb{C}^N \mid \forall k \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket, z_k = \overline{z_{N-k}} \right\}$$

qui est un sous-espace vectoriel de dimension $N-1$ de \mathbb{C}^N .

Or, nous pouvons remarquer que

Proposition 2.1.8. *L'application $\tilde{\mathcal{F}}$ définie dans (2.1.4) n'est pas une isométrie de \mathbb{R}^{N-1} dans D_2 .*

Démonstration. Il suffit de prendre $\tilde{x} = (1, 0, \dots, 0)$ et $\tilde{x}' = (0, 1, 0, \dots, 0)$ et de voir que $\langle \tilde{x}, \tilde{x}' \rangle_{\mathbb{R}^{N-1}} = 0$ et pourtant $\langle \tilde{\mathcal{F}}(\tilde{x}), \tilde{\mathcal{F}}(\tilde{x}') \rangle_{\mathbb{C}^{N-1}} = 1$. \square

Même si nous n'avons pas une isométrie, nous pourrions tout de même utiliser ce changement de variables pour simplifier le calcul des points critiques ainsi que l'indice de selle de ces points. Comme dans la transformée de Fourier usuelle, un objet utile de cette théorie est la transformée inverse. Donnons donc la formule de la transformée de Fourier discrète inverse :

Proposition 2.1.9. *Pour tout $j \in \llbracket 1, N \rrbracket$ on a*

$$x_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=1}^{N-1} \bar{\omega}^{jk} y_k \quad (2.1.5)$$

Démonstration. En intégrant le terme $k = 0$ (car $y_0 = 0$) et remplaçant y_k par sa formule (2.1.1) le terme de droite de (2.1.5) (T_d pour simplifier) s'écrit :

$$T_d = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k=0}^{N-1} \bar{\omega}^{jk} \left(\frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N \omega^{lk} x_l \right)$$

En inversant les deux sommes et en remplaçant ω par sa valeur on obtient :

$$T_d = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N x_l \sum_{k=0}^{N-1} e^{\frac{2ik\pi}{N}(l-j)}$$

On sait que $\sum_{k=0}^{N-1} e^{\frac{2ik\pi}{N}} = 0$ donc :

$$T_d = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N x_l N \delta_{lj} = x_j$$

\square

On a introduit cette transformation afin d'étudier le potentiel V . Il nous faudrait donc une écriture de V en fonction des coordonnées de Fourier. Si on note $\hat{V} = V \circ \mathcal{F}$ le potentiel V en fonction de y alors :

Proposition 2.1.10.

$$\hat{V}(y) = \frac{1}{4N} \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3, k_4 \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket \\ k_1 + k_2 + k_3 + k_4 \equiv 0 [N]}} y_{k_1} y_{k_2} y_{k_3} y_{k_4} - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} (1 - \gamma + \gamma \operatorname{Re}(\omega^k)) |y_k|^2 \quad (2.1.6)$$

Démonstration. On peut réécrire la formule (2.0.1) du potentiel de la façon suivante

$$V(x) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N x_i^4 - \frac{1}{2} (1 - \gamma) \sum_{i=1}^N x_i^2 - \frac{\gamma}{2} \sum_{i=1}^N x_i x_{i+1}$$

En remplaçant x_i par la formule (2.1.5) dans l'écriture de V (en intégrant les termes y_0) et en développant on obtient :

$$V(x) = \frac{1}{4N^2} \sum_{j=1}^N \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4 \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket} \bar{\omega}^{j(k_1+k_2+k_3+k_4)} y_{k_1} y_{k_2} y_{k_3} y_{k_4} \\ - \frac{1}{2N} (1-\gamma) \sum_{j=1}^N \sum_{k_1, k_2 \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket} \bar{\omega}^{j(k_1+k_2)} y_{k_1} y_{k_2} - \frac{\gamma}{2N} \sum_{j=1}^N \sum_{k_1, k_2 \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket} \bar{\omega}^{j k_1 + (j+1) k_2} y_{k_1} y_{k_2}$$

On intervertit les sommes multiples avec les sommes sur j et comme $\sum_{k=1}^N e^{\frac{2ik\pi}{N}} = 0$, on obtient

$$V(x) = \frac{1}{4N^2} \sum_{k_1, k_2, k_3, k_4 \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket} y_{k_1} y_{k_2} y_{k_3} y_{k_4} N \delta_{k_1+k_2+k_3+k_4 \equiv 0[N]} \\ - \frac{1}{2N} (1-\gamma) \sum_{k_1, k_2 \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket} y_{k_1} y_{k_2} N \delta_{k_1+k_2 \equiv 0[N]} - \frac{\gamma}{2N} \sum_{k_1, k_2 \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket} y_{k_1} y_{k_2} N \bar{\omega}^{k_2} \delta_{k_1+k_2 \equiv 0[N]}$$

En intégrant les symboles de Kronecker aux sommes, on a

$$V(x) = \frac{1}{4N} \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3, k_4 \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket \\ k_1+k_2+k_3+k_4 \equiv 0[N]}} y_{k_1} y_{k_2} y_{k_3} y_{k_4} - \frac{1}{2} (1-\gamma) \sum_{\substack{k_1, k_2 \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket \\ k_1+k_2 \equiv 0[N]}} y_{k_1} y_{k_2} - \frac{\gamma}{2} \sum_{\substack{k_1, k_2 \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket \\ k_1+k_2 \equiv 0[N]}} y_{k_1} y_{k_2} \bar{\omega}^{k_2}$$

En réécrivant les doubles sommes, on a

$$V(x) = \frac{1}{4N} \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3, k_4 \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket \\ k_1+k_2+k_3+k_4 \equiv 0[N]}} y_{k_1} y_{k_2} y_{k_3} y_{k_4} - \frac{1}{2} (1-\gamma) \sum_{k=0}^{N-1} y_k y_{N-k} - \frac{\gamma}{2} \sum_{k=0}^{N-1} y_k y_{N-k} \bar{\omega}^k$$

Comme $y_{N-k} = y_{-k} = \bar{y}_k$, on a

$$V(x) = \frac{1}{4N} \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3, k_4 \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket \\ k_1+k_2+k_3+k_4 \equiv 0[N]}} y_{k_1} y_{k_2} y_{k_3} y_{k_4} - \frac{1}{2} (1-\gamma) \sum_{k=0}^{N-1} y_k \bar{y}_k - \frac{\gamma}{2} \sum_{k=0}^{N-1} y_k \bar{y}_k \bar{\omega}^k$$

En regroupant les deux dernières sommes et en simplifiant les termes y_0 (qui sont nuls), on a

$$V(x) = \frac{1}{4N} \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3, k_4 \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket \\ k_1+k_2+k_3+k_4 \equiv 0[N]}} y_{k_1} y_{k_2} y_{k_3} y_{k_4} - \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N-1} (1-\gamma + \gamma \bar{\omega}^k) |y_k|^2$$

Pour terminer la preuve il suffit de remarquer que :

$$\sum_{k=1}^{N-1} \bar{\omega}^k |y_k|^2 = \sum_{k=1}^{N-1} \operatorname{Re}(\omega^k) |y_k|^2$$

□

Pour trouver les points critiques du potentiel, nous allons devoir résoudre le système

$$\frac{\partial \tilde{V}}{\partial x_i}(\tilde{x}) = 0, \quad i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket. \quad (2.1.7)$$

L'idéal serait que cela soit équivalent à résoudre le système

$$\frac{\partial \hat{V}}{\partial y_i}(y) = 0, \quad i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket. \quad (2.1.8)$$

Pour ce faire, nous avons besoin d'un lemme qui va utiliser le déterminant de Vandermonde que nous rappelons sans donner sa démonstration

Proposition 2.1.11 (Matrice de Vandermonde (voir [20])). *Soient $\alpha_1, \dots, \alpha_n \in \mathbb{C}^n$. Soit la matrice*

$$V = \begin{pmatrix} 1 & \alpha_1 & \alpha_1^2 & \cdots & \alpha_1^{n-1} \\ 1 & \alpha_2 & \alpha_2^2 & \cdots & \alpha_2^{n-1} \\ 1 & \alpha_3 & \alpha_3^2 & \cdots & \alpha_3^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \alpha_n & \alpha_n^2 & \cdots & \alpha_n^{n-1} \end{pmatrix} \quad (2.1.9)$$

On a alors

$$\det V = \prod_{1 \leq j < i \leq n} (\alpha_i - \alpha_j) \quad (2.1.10)$$

Lemme 2.1.12. *Soit la matrice $M \in \mathcal{M}_{N-1}(\mathbb{C})$ définie par*

$$M = \begin{pmatrix} \omega - 1 & \omega^2 - 1 & \cdots & \omega^{N-1} - 1 \\ \omega^2 - 1 & \omega^4 - 1 & \cdots & \omega^{2(N-1)} - 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \omega^{N-1} - 1 & \omega^{2(N-1)} - 1 & \cdots & \omega^{(N-1)(N-1)} - 1 \end{pmatrix} \quad (2.1.11)$$

Alors on a :

$$\det M = \prod_{0 \leq j < i \leq N-1} (\omega^i - \omega^j) \neq 0 \quad (2.1.12)$$

Démonstration. La matrice de Vandermonde (2.1.9), dans le cas particulier où $\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket$, $\alpha_i = \omega^i$, s'écrit

$$V = \begin{pmatrix} 1 & \omega & \omega^2 & \cdots & \omega^{N-1} \\ 1 & \omega^2 & \omega^4 & \cdots & \omega^{2(N-1)} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \omega^{N-1} & \omega^{2(N-1)} & \cdots & \omega^{(N-1)(N-1)} \\ 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \end{pmatrix}$$

En faisant des opérations sur les lignes on voit que

$$\det V = \begin{vmatrix} 0 & & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & M & \\ 1 & 1 & \cdots & 1 \end{vmatrix}$$

Avec la formule du déterminant de Vandermonde (2.1.10) on a

$$(-1)^{N+1} \det M = \prod_{1 \leq j < i \leq N} (\omega^i - \omega^j)$$

En changeant l'indice du double produit alors

$$\det M = (-1)^{N+1} \prod_{0 \leq j < i \leq N-1} \omega(\omega^i - \omega^j)$$

Et comme $|\{i, j \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket \mid 0 \leq j < i \leq N-1\}| = \frac{(N-1)N}{2}$, d'où

$$\det M = (-1)^{N+1} \omega^{\frac{(N-1)N}{2}} \prod_{0 \leq j < i \leq N-1} (\omega^i - \omega^j)$$

Si N est pair alors

$$(-1)^{N+1} \omega^{\frac{(N-1)N}{2}} = -\left(\omega^{\frac{N}{2}}\right)^{N-1} = -(-1)^{N-1} = 1$$

Si N est impair alors

$$(-1)^{N+1} \omega^{\frac{(N-1)N}{2}} = (\omega^N)^{\frac{N-1}{2}} = (1)^{\frac{N-1}{2}} = 1$$

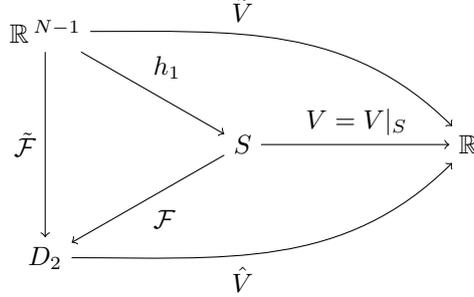
Et comme $\omega^i - \omega^j \neq 0$ pour $0 \leq j < i \leq N-1$, on obtient le résultat voulu. \square

Nous avons alors

Proposition 2.1.13. *On a l'équivalence*

$$\forall i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket, \frac{\partial \tilde{V}}{\partial x_i}(\tilde{x}) = 0 \Leftrightarrow \forall i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket, \frac{\partial \hat{V}}{\partial y_i}(y) = 0 \quad (2.1.13)$$

Démonstration. Résumons toutes les fonctions que nous avons avec le graphe suivant



Nous avons donc l'égalité : $\tilde{V} = \hat{V} \circ \mathcal{F} \circ h_1$. En notant $Jh_1(x) \in \mathcal{M}_{N, N-1}(\mathbb{C})$ (respectivement $J\mathcal{F}(h_1(x)) \in \mathcal{M}_{N-1, N}(\mathbb{C})$) la matrice jacobienne de h_1 en x (respectivement de \mathcal{F} en $h_1(x)$), par la formule des dérivées partielles composées, on a alors l'égalité matricielle

$$\left(\frac{\partial \tilde{V}}{\partial x_i}(x) \right)_{i=1, \dots, N-1} = {}^t Jh_1(x) {}^t J\mathcal{F}(h_1(x)) \left(\frac{\partial \hat{V}}{\partial y_i}(x) \right)_{i=1, \dots, N-1}$$

Alors l'implication de droite vers la gauche est évidente. Pour l'autre implication, il suffit d'abord de calculer le produit des transposées des jacobienes ${}^t Jh_1(x) {}^t J\mathcal{F}(h_1(x)) \in \mathcal{M}_{N-1}(\mathbb{C})$

$${}^t Jh_1(x) {}^t J\mathcal{F}(h_1(x)) = \frac{1}{\sqrt{N}} M$$

où la matrice $M \in \mathcal{M}_{N-1}(\mathbb{C})$ est celle définie dans (2.1.11). Et comme elle est inversible, on obtient bien l'autre implication. \square

Maintenant que l'équivalence est démontrée, il nous reste à donner l'expression des dérivées partielles de \hat{V} :

Proposition 2.1.14. *Pour $k \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket$ on a :*

$$\frac{\partial \hat{V}}{\partial y_k}(y) = \frac{1}{N} \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3 \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket \\ k_1 + k_2 + k_3 \equiv N-k [N]}} y_{k_1} y_{k_2} y_{k_3} - (1 - \gamma + \gamma \operatorname{Re}(w^k)) y_{N-k} \quad (2.1.14)$$

Démonstration. En utilisant la formule (2.1.6) et le fait que $|y_k|^2 = y_k y_{N-k}$ on a

$$\frac{\partial \hat{V}}{\partial y_k}(y) = \frac{1}{4} \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3 \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket \\ k_1 + k_2 + k_3 \equiv N-k [N]}} y_{k_1} y_{k_2} y_{k_3} - \frac{1}{2} (1 - \gamma + \gamma \operatorname{Re}(w^k)) y_{N-k} - \frac{1}{2} (1 - \gamma + \gamma \operatorname{Re}(w^{N-k})) y_{N-k}.$$

En remarquant que

$$\operatorname{Re}(w^k) = \operatorname{Re}(w^{N-k}),$$

on obtient le résultat voulu. \square

Par la suite on posera

$$\lambda_k = (1 - \gamma + \gamma \operatorname{Re}(w^k)). \quad (2.1.15)$$

Remarque 2.1.15. $\lambda_0 = 1$ et $\lambda_k = \lambda_{N-k}$.

Nous pouvons aussi remarquer que

$$\overline{\frac{\partial \hat{V}}{\partial y_i}}(y) = \frac{\partial \hat{V}}{\partial y_{N-i}}(y), \quad (2.1.16)$$

donc l'équivalence dans la proposition 2.1.13 peut se réduire à

$$\forall i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket, \frac{\partial \tilde{V}}{\partial x_i}(\tilde{x}) = 0 \Leftrightarrow \forall i \in \left[\left[1, \left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor \right] \right], \frac{\partial \hat{V}}{\partial y_i}(y) = 0 \quad (2.1.17)$$

où la fonction $\lfloor \cdot \rfloor$ désigne la partie entière.

Et pour finir, comme il nous faut calculer l'indice de selle des points critiques, il nous faut une formule pour la matrice hessienne. L'écriture des dérivées partielles secondes de \hat{V} est :

Proposition 2.1.16. *Pour $k, j \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket$ on a :*

$$\frac{\partial^2 \hat{V}}{\partial y_k \partial y_j}(y) = -\lambda_k \delta_{j, N-k} + \frac{3}{N} \sum_{\substack{k_1, k_2 \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket \\ k_1 + k_2 \equiv N-k-j [N]}} y_{k_1} y_{k_2} \quad (2.1.18)$$

Démonstration. Grâce à la formule (2.1.14) on sait que

$$\frac{\partial \hat{V}}{\partial y_k}(y) = \frac{1}{N} \sum_{\substack{k_1, k_2, k_3 \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket \\ k_1 + k_2 + k_3 \equiv N-k [N]}} y_{k_1} y_{k_2} y_{k_3} - \lambda_k y_{N-k}$$

Donc en faisant une dérivée partielle par rapport à y_j dans cette relation, on obtient le résultat voulu. \square

Maintenant, nous pouvons donner l'expression des matrices hessiennes :

Proposition 2.1.17. *Notons $\tilde{H}(x)$ (respectivement $\hat{H}(y)$) la matrice hessienne de \tilde{V} en x (respectivement de \hat{V} en y). On a la relation*

$$\tilde{H}(x) = \frac{1}{N} M \hat{H}(\mathcal{F} \circ h_1(x)) M \quad (2.1.19)$$

Démonstration. On a vu que

$$\forall i \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket, \frac{\partial \tilde{V}}{\partial x_i}(x) = \sum_{k=1}^{N-1} \frac{\partial \hat{V}}{\partial y_k}(\mathcal{F} \circ h_1(x)) \frac{\partial (\mathcal{F} \circ h_1)_k}{\partial x_i}(x)$$

où $(\mathcal{F} \circ h_1)_k$ est la k -ième composante de $\mathcal{F} \circ h_1$. En faisant maintenant une dérivée partielle par rapport à x_j et en remarquant que $\frac{\partial^2 (\mathcal{F} \circ h_1)_k}{\partial x_i \partial x_j}(x) = 0$ on obtient

$$\forall i, j \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket, \frac{\partial^2 \tilde{V}}{\partial x_i \partial x_j}(x) = \sum_{k, l \in \llbracket 1, N-1 \rrbracket} \frac{\partial^2 \hat{V}}{\partial y_k \partial y_l}(\mathcal{F} \circ h_1(x)) \frac{\partial (\mathcal{F} \circ h_1)_l}{\partial x_j}(x) \frac{\partial (\mathcal{F} \circ h_1)_k}{\partial x_i}(x)$$

d'où la relation (2.1.19). \square

Nous allons, dans les trois sous-sections suivantes, appliquer ces différents résultats aux cas des petites dimensions.

2.2 Cas $N = 2$

2.2.1 Résultats

Avant de donner les résultats pour ce cas, nous allons introduire deux définitions qui seront utilisées pour nos cas de petites dimensions (ainsi que pour les cas de dimension quelconque du chapitre suivant) ainsi qu'une proposition qui nous permettra de simplifier ce que l'on appellera diagramme de bifurcation.

Proposition 2.2.1. *Considérons les fonctions suivantes :*

$$R : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^N & \rightarrow & \mathbb{R}^N \\ (x_1, x_2, \dots, x_{N-1}, x_N) & \mapsto & (x_N, x_1, x_2, \dots, x_{N-1}) \end{array} \quad (2.2.1)$$

$$S : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^N & \rightarrow & \mathbb{R}^N \\ (x_1, x_2, \dots, x_{N-1}, x_N) & \mapsto & (x_N, x_{N-1}, \dots, x_2, x_1) \end{array} \quad (2.2.2)$$

$$C : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^N & \rightarrow & \mathbb{R}^N \\ (x_1, x_2, \dots, x_{N-1}, x_N) & \mapsto & (-x_1, -x_2, \dots, -x_{N-1}, -x_N) \end{array} \quad (2.2.3)$$

Soit $x \in \mathbb{R}^N$ un point critique de V sous la contrainte alors les points

$$R^k(x), R^k \circ S(x), R^k \circ C(x), R^k \circ S \circ C(x) \text{ pour tout } k \in \llbracket 0, N-1 \rrbracket \quad (2.2.4)$$

sont aussi des points critiques de V sous la contrainte.

Démonstration. Cela se démontre facilement en remarquant que

$$V \circ R(x) = V(x), V \circ S(x) = V(x), V \circ C(x) = V(x) \text{ pour tout } x \in \mathbb{R}^N$$

□

Définition 2.2.2. *On appellera diagramme de bifurcation, le diagramme des points critiques en fonction du paramètre de couplage γ qui vérifie*

- le nombre écrit au dessus d'un chemin entre deux • est l'indice de la selle du point critique au même niveau que le premier • pour γ compris entre les valeurs des deux projections des • sur l'axe des γ ,
- le nombre écrit au dessus d'un chemin partant d'un • et ne se terminant pas, est l'indice de la selle du point critique au même niveau que ce • pour γ entre la projection de ce • sur la l'axe des γ et $+\infty$,
- deux chemins entre deux • se rejoignent en un même • si et seulement si pour γ égal à la valeur de la projection de ce • commun sur l'axe des γ les deux points critiques sont confondus,
- le coefficient multiplicatif encadré $\boxed{\times \alpha}$ à gauche des points critiques signifie qu'il y a α points critiques déduits de celui-ci (voir la proposition 2.2.1).

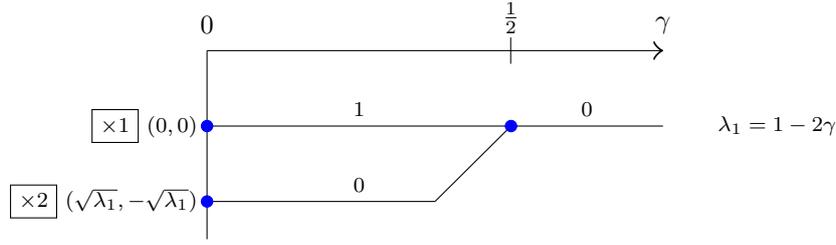
Ici lorsque l'on parle de chemin entre deux •, on veut parler d'un chemin qui ne contient que deux • pour extrémité et allant de la gauche vers la droite.

Définition 2.2.3. *On appelle graphe des liaisons, le graphe avec pour ensemble de sommets les minima locaux et pour ensemble d'arêtes $E = \{(i, j)\}$ vérifiant*

$$(i, j) \in E \Leftrightarrow \exists \Gamma : [0, 1] \rightarrow S, \exists \alpha \in]0, 1[, \begin{cases} \Gamma(0) = i \text{ et } \Gamma(1) = j \text{ et } \Gamma(\alpha) \text{ est l'unique} \\ \text{point selle sur }]0, 1[\text{ et est d'indice 1 et} \\ V \circ \Gamma \text{ est croissante sur } [0, \alpha] \\ \text{puis décroissante sur } [\alpha, 1] \end{cases} \quad (2.2.5)$$

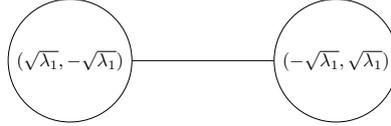
Maintenant que ces deux définitions sont posées, nous pouvons passer à l'étude de ce cas. Nous avons les deux propositions suivantes :

Proposition 2.2.4. *On a le diagramme de bifurcation suivant*



Démonstration. Faite dans les sous-sections 2.2.2 et 2.2.3. □

Proposition 2.2.5. *Pour $\gamma \in [0, \frac{1}{2}[$ on a le graphe des liaisons suivant :*



Démonstration. Faite dans la sous-section 2.2.4. □

2.2.2 Recherche des points critiques

Avec les notations de la définition 2.1.1 sur la transformée de Fourier discrète on a :

$$\omega = -1, \lambda_1 = 1 - 2\gamma. \quad (2.2.6)$$

En appliquant la formule (2.1.14) on a :

$$\frac{\partial \hat{V}}{\partial y_1}(y) = \frac{1}{2}y_1^3 - \lambda_1 y_1 = y_1 \left(\frac{1}{2}y_1^2 - \lambda_1 \right). \quad (2.2.7)$$

Donc :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \hat{V}}{\partial y_1}(y) = 0 &\Leftrightarrow y_1 \left(\frac{1}{2}y_1^2 - \lambda_1 \right) = 0 \Leftrightarrow y_1 = 0 \text{ ou } \frac{1}{2}y_1^2 - \lambda_1 = 0 \Leftrightarrow y_1 = 0 \text{ ou } y_1^2 = 2\lambda_1 \\ &\Leftrightarrow y_1 = 0 \text{ ou } (y_1 = \pm\sqrt{2\lambda_1} \text{ et } 2\lambda_1 \geq 0) \Leftrightarrow y_1 = 0 \text{ ou } (y_1 = \pm\sqrt{2\lambda_1} \text{ et } \gamma \leq \frac{1}{2}) \end{aligned}$$

En utilisant la formule (2.1.5) on obtient deux cas :

- $y_1 = 0 \Leftrightarrow x_1 = x_2 = 0$
- $y_1 = \pm\sqrt{2\lambda_1} \Leftrightarrow x_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}y_1 = \mp\sqrt{\lambda_1}, x_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}y_1 = \pm\sqrt{\lambda_1}$

2.2.3 Étude de l'indice des selles

Maintenant il faut étudier ces point critiques pour trouver leur indice. En utilisant la formule (2.1.19), la matrice hessienne est

$$H_y = \left[\frac{3}{4}y_1^2 - \frac{1}{2}\lambda_1 \right] \quad (2.2.8)$$

Alors pour :

- $y_1 = 0$ on a $H_y = \left[\gamma - \frac{1}{2} \right]$
Si $\gamma < \frac{1}{2}$ alors c'est une selle d'indice 1.
Si $\gamma > \frac{1}{2}$ alors c'est une selle d'indice 0.
- $y_1 = \pm\sqrt{2\lambda_1}$ on a $H_y = \left[1 - 2\gamma \right]$
 $1 - 2\gamma > 0$ car $\gamma < \frac{1}{2}$ donc c'est une selle d'indice 0.

De plus les deux points critiques $(\pm\sqrt{\lambda_1}, \mp\sqrt{\lambda_1})$ et le point critique $(0, 0)$ sont confondus lorsque $\gamma = \frac{1}{2}$.

D'où le diagramme de bifurcation.

2.2.4 Étude des liaisons

Nous avons deux points critiques d'indice de selle 0 (qui sont $(\sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1})$ et $(-\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1})$) et un point critique d'indice de selle 1 (qui est $(0, 0)$). Pour montrer que $(\sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1})$ et $(-\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1})$ sont reliés, il nous faut un chemin passant par ces deux points et par le point $(0, 0)$ comme dans la définition 2.2.3.

Nous allons considérer un chemin linéaire. Soit $t \in [0, 1]$ et définissons le chemin Γ par :

$$\Gamma(t) = ((1 - 2t)\sqrt{\lambda_1}, (2t - 1)\sqrt{\lambda_1}) \quad (2.2.9)$$

Remarquons que ce chemin respecte bien la contrainte et passe bien par tous les points :

$$\begin{aligned} \Gamma(0) &= (\sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1}) \\ \Gamma\left(\frac{1}{2}\right) &= (0, 0) \\ \Gamma(1) &= (-\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}) \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

Il nous faut donc montrer que la fonction $V \circ \Gamma$ est croissante sur $[0, \frac{1}{2}]$ puis décroissante sur $[\frac{1}{2}, 1]$. En développant l'expression de $V \circ \Gamma$, puis en dérivant on a

$$(V \circ \Gamma)'(t) = 16(2t - 1)(t - 1)(1 - 2\gamma)^2 \quad (2.2.11)$$

Donc on en déduit bien que la fonction $V \circ \Gamma$ est croissante sur $[0, \frac{1}{2}]$ puis décroissante sur $[\frac{1}{2}, 1]$.

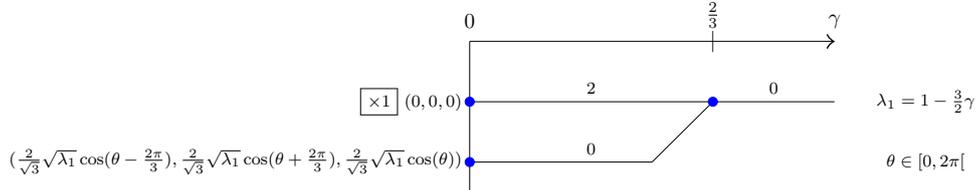
D'où le graphe des liaisons.

2.3 Cas $N = 3$

2.3.1 Résultats

En utilisant les définitions 2.2.2 et 2.2.3, l'étude pour ce cas nous donne la proposition suivante :

Proposition 2.3.1. *On a le diagramme de bifurcation suivant :*



Ici on remarque qu'on a une famille de minima locaux, ce qui fait que l'on est dans un cas dégénéré (dans le sens où l'une des valeurs de la matrice hessienne de cette famille est 0). Nous ferons donc l'étude des points critiques ainsi que leur indice de selle mais nous n'irons pas plus loin pour ce cas.

Démonstration. Faite dans les sous-sections 2.3.2 et 2.3.3. □

2.3.2 Recherche des points critiques

Avec les notations de la définition 2.1.1 sur la transformée de Fourier discrète on a :

$$\omega = e^{\frac{2i\pi}{3}}, \lambda_1 = \lambda_2 = 1 - \frac{3}{2}\gamma, y_2 = \bar{y}_1 \quad (2.3.1)$$

Nous savons par (2.1.17) qu'il est nécessaire et suffisant d'avoir $\frac{\partial \hat{V}}{\partial y_1}(y) = 0$ pour trouver les points critiques. En appliquant la formule (2.1.14) on a :

$$\frac{\partial \hat{V}}{\partial y_1}(y) = \frac{1}{3}(3y_1 y_2^2) - \lambda_1 y_2 = y_1 \bar{y}_1^2 - \lambda_1 \bar{y}_1 = \bar{y}_1(y_1 \bar{y}_1 - \lambda_1) = \bar{y}_1(|y_1|^2 - \lambda_1) \quad (2.3.2)$$

Pour résoudre l'équation $\frac{\partial \hat{V}}{\partial y_1}(y) = 0$, passons en coordonnées polaires, alors :

$$\frac{\partial \hat{V}}{\partial y_1}(y) = 0 \Leftrightarrow r(r^2 - \lambda_1) = 0 \text{ avec } y_1 = r e^{i\theta}. \quad (2.3.3)$$

En utilisant la formule (2.1.5) on obtient deux cas :

- $r = 0 \Leftrightarrow y_1 = y_2 = 0 \Leftrightarrow x_1 = x_2 = x_3 = 0$
- $r^2 = \lambda_1 \Leftrightarrow r = \sqrt{\lambda_1}$ et $\lambda_1 > 0 \Leftrightarrow y_1 = \sqrt{\lambda_1} e^{i\theta}$ et $y_2 = \sqrt{\lambda_1} e^{-i\theta}$ et $\gamma < \frac{2}{3}$
 $\Leftrightarrow (x_1, x_2, x_3) = \left(\frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{\lambda_1} \cos\left(\theta - \frac{2\pi}{3}\right), \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{\lambda_1} \cos\left(\theta + \frac{2\pi}{3}\right), \frac{2}{\sqrt{3}} \sqrt{\lambda_1} \cos(\theta) \right)$ et $\gamma < \frac{2}{3}$

2.3.3 Étude des indices de selle

Maintenant il faut étudier ces points critiques pour savoir quel indice de selle ils ont. En utilisant la formule (2.1.19), la matrice hessienne est :

$$H_{(y_1, y_2)} = \begin{bmatrix} -\omega y_2^2 + 4y_1 y_2 - 2\lambda_1 - \omega^2 y_1^2 & y_1^2 + 2y_1 y_2 + y_2^2 - \lambda_1 \\ y_1^2 + 2y_1 y_2 + y_2^2 - \lambda_1 & -\omega^2 y_2^2 + 4y_1 y_2 - 2\lambda_1 - \omega y_1^2 \end{bmatrix} \quad (2.3.4)$$

Alors pour :

- $y_1 = y_2 = 0$ on a

$$H_{(y_1, y_2)} = \begin{bmatrix} -2\lambda_1 & -\lambda_1 \\ -\lambda_1 & -2\lambda_1 \end{bmatrix} \quad (2.3.5)$$

En calculant le polynôme caractéristique de H puis en résolvant l'équation du second degré on trouve que les racines sont

$$X_\pm = 2\lambda_1 - |\lambda_1| \quad (2.3.6)$$

Si $\gamma < \frac{2}{3}$ alors $X_\pm < 0$ c'est donc une selle d'indice 2.

Si $\gamma > \frac{2}{3}$ alors $X_\pm > 0$ c'est donc une selle d'indice 0.

- $y_1 = \pm \sqrt{\lambda_1} e^{i\theta}$ et $y_2 = \pm \sqrt{\lambda_1} e^{-i\theta}$ on a

$$H_{(y_1, y_2)} = \lambda_1 \begin{bmatrix} 2 + \cos(2\theta) + \sqrt{3} \sin(2\theta) & 1 + 2 \cos(2\theta) \\ (1 + 2 \cos(2\theta)) & 2 + \cos(2\theta) - \sqrt{3} \sin(2\theta) \end{bmatrix} \quad (2.3.7)$$

En calculant le polynôme caractéristique de H puis en résolvant l'équation du second degré on trouve que les racines sont

$$0 \text{ et } \lambda_1(4 + 2 \cos(2\theta)) \quad (2.3.8)$$

Donc une des racines est nulle et l'autre est strictement positive.

De plus la famille de points critiques et le point critique $(0, 0, 0)$ sont confondus lorsque $\gamma = \frac{2}{3}$. D'où le diagramme de bifurcation.

2.3.4 Conclusion

Nous avons une infinité de points critiques d'indice 0 (qui décrivent un cercle) donc nous n'irons pas plus loin dans ce cas.

Remarque 2.3.2. On verra plus tard que si N est un multiple de 3 alors on sera dans un cas similaire.

2.4 Cas $N = 4$

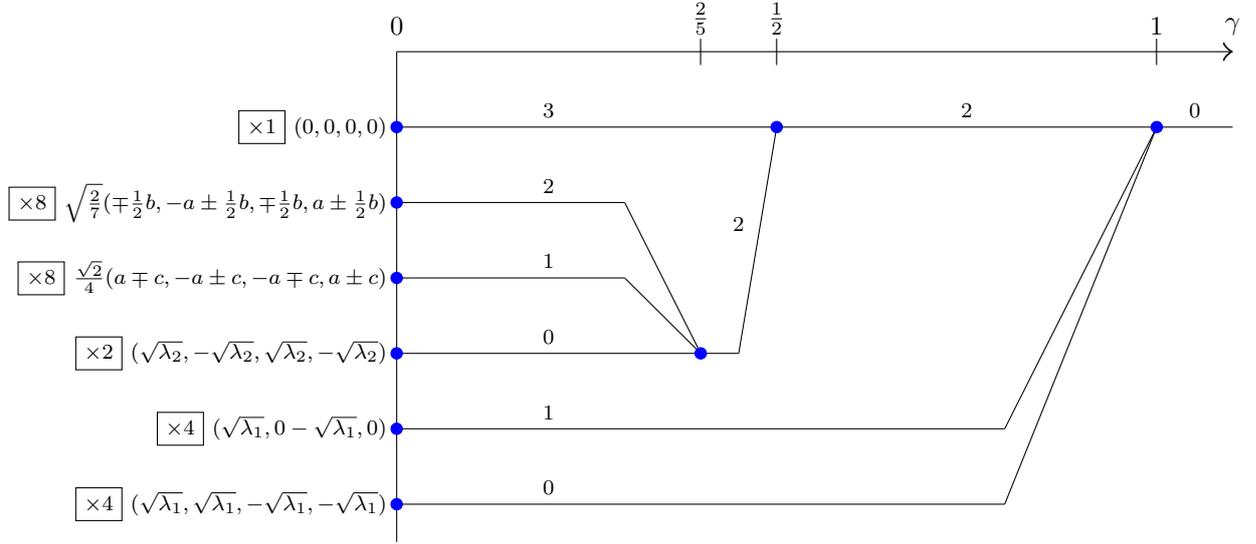
2.4.1 Résultats

En utilisant les définitions 2.2.2 et 2.2.3, l'étude pour ce cas nous donne les deux propositions suivantes :

Proposition 2.4.1. *Posons :*

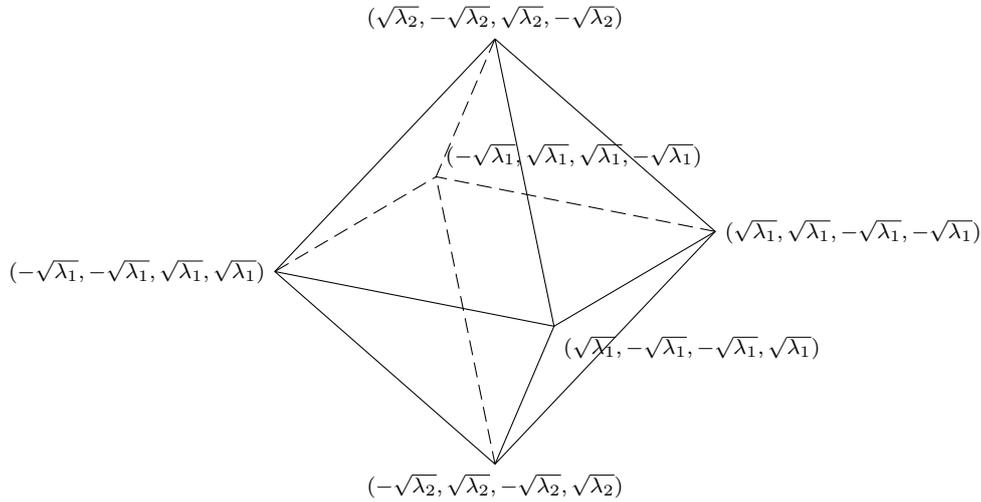
$$a = \sqrt{2 - 5\gamma}, \quad b = \sqrt{2 + 2\gamma}, \quad c = \sqrt{2 - \gamma}, \quad \lambda_1 = 1 - \gamma, \quad \lambda_2 = 1 - 2\gamma$$

Alors on a le diagramme de bifurcation suivant :



Démonstration. Faite dans les sous-sections 2.4.2 et 2.4.3. □

Proposition 2.4.2. *Pour $\gamma \in [0, \frac{1}{4}(3 - \sqrt{2})]$ le graphe des liaisons est donné par :*



Nous remarquons qu'au lieu de donner le graphe des liaisons dans le cas $\gamma \in [0, \frac{2}{5}[$, nous avons pris $\frac{1}{4}(3 - \sqrt{2})$. C'est un point purement technique, qui apparaîtra dans la démonstration, pour nous simplifier la tâche car nous voudrions prendre le même type de chemin que dans la sous-section 2.2.4 (du cas $N = 2$), c'est à dire des chemins linéaires. Dans le cas $\gamma \in]\frac{1}{4}(3 - \sqrt{2}), \frac{2}{5}[$, il faudrait prendre des chemins non linéaires pour démontrer que le graphe des liaisons est toujours le même, mais nous ne traiterons pas ce cas.

Démonstration. Faite dans la sous-section 2.4.4. \square

2.4.2 Recherche des points critiques

Avec les notations de la définition 2.1.1 sur la transformée de Fourier discrète on a :

$$\omega = i, \lambda_1 = \lambda_3 = 1 - \gamma, \lambda_2 = 1 - 2\gamma, \bar{y}_3 = y_1, y_2 = \bar{y}_2 \in \mathbb{R} \quad (2.4.1)$$

Nous savons par (2.1.17) qu'il est nécessaire et suffisant d'avoir $\frac{\partial \hat{V}}{\partial y_1}(y) = \frac{\partial \hat{V}}{\partial y_2}(y) = 0$ pour trouver les points critiques. En appliquant la formule (2.1.14), on va chercher à résoudre le système :

$$\begin{cases} \frac{\partial \hat{V}}{\partial y_1}(y) = \frac{1}{4}(3y_1 y_3^2 + 3y_2^2 y_3 + y_1^3) - \lambda_1 y_3 = 0 \\ \frac{\partial \hat{V}}{\partial y_2}(y) = \frac{1}{4}(6y_1 y_2 y_3 + y_2^3) - \lambda_2 y_2 = 0 \end{cases} \quad (2.4.2)$$

Pour faire cela, passons en coordonnées polaires en y_1 . Posons $y_1 = r e^{i\theta}$, alors on a :

$$\begin{cases} r(r^2 e^{3i\theta} + 3r^2 e^{-i\theta} + 3e^{-i\theta} y_2^2 - 4\lambda_1 e^{-i\theta}) = 0 \\ y_2(6r^2 + y_2^2 - 4\lambda_2) = 0 \end{cases} \quad (2.4.3)$$

Alors :

- si $r = 0$ alors l'équation (2.4.3) est toujours satisfaite et l'équation (2.4.4) se réduit à $y_2(y_2^2 - 4\lambda_2) = 0$ d'où :
 - si $y_2 = 0$ alors $y_1 = y_2 = y_3 = 0$ d'où

$$x_1 = x_2 = x_3 = x_4 = 0. \quad (2.4.5)$$

- si $y_2^2 - 4\lambda_2 = 0$ alors $y_2 = \pm 2\sqrt{\lambda_2}$ avec $\lambda_2 > 0 \Leftrightarrow \gamma < \frac{1}{2}$ et $y_1 = y_3 = 0$ donc :

$$\begin{aligned} x_1 &= -\frac{1}{2}y_2 = \mp \sqrt{\lambda_2}, \quad x_2 = \frac{1}{2}y_2 = \pm \sqrt{\lambda_2}, \\ x_3 &= -\frac{1}{2}y_2 = \mp \sqrt{\lambda_2}, \quad x_4 = \frac{1}{2}y_2 = \pm \sqrt{\lambda_2}. \end{aligned} \quad (2.4.6)$$

- si $r \neq 0$ alors, en faisant des opérations élémentaires pour laisser seul r^2 d'un côté de l'égalité, l'équation (2.4.3) est équivalente à :

$$r^2 = \frac{12\lambda_1 + 4\lambda_1 e^{-4i\theta} - 9y_2^2 - 3e^{-4i\theta} y_2^2}{10 + 6 \cos(4\theta)} \quad (2.4.7)$$

Or $r \in \mathbb{R}_+^*$ donc

$$\text{Im}(r^2) = 0 \Leftrightarrow 4\lambda_1 \sin(-4\theta) - 3 \sin(-4\theta) y_2^2 = 0 \Leftrightarrow \sin(4\theta)(4\lambda_1 - 3y_2^2) = 0 \quad (2.4.8)$$

- Si $y_2^2 = \frac{4}{3}\lambda_1$ alors l'équation (2.4.7) est équivalente à :

$$r^2 = 0 \quad (2.4.9)$$

C'est absurde car $r \neq 0$ donc ce cas n'est pas possible.

- Si $\sin(4\theta) = 0$ alors $\theta = \frac{k}{4}\pi$ avec $k \in \llbracket 0, 7 \rrbracket$. On a $\cos(4\theta) = \pm 1$ suivant la parité de k , d'où :
 - Si k est pair alors $\cos(4\theta) = 1$ et l'équation (2.4.7) est équivalente à :

$$r^2 = \frac{16\lambda_1 - 12y_2^2}{16} = \frac{4\lambda_1 - 3y_2^2}{4} \quad (2.4.10)$$

L'équation (2.4.4) est alors équivalente à :

$$y_2(6\lambda_1 - 4\lambda_2 - \frac{7}{2}y_2^2) = 0 \quad (2.4.11)$$

- Si $y_2 = 0$ l'équation (2.4.10) est équivalente à

$$r = \sqrt{\lambda_1} \text{ et } \gamma < 1 \quad (2.4.12)$$

- Si $y_2^2 = \frac{2}{7}(6\lambda_1 - 4\lambda_2)$ comme $6\lambda_1 - 4\lambda_2 = 2 + 2\gamma > 0$, en remplaçant l'expression de y_2^2 , l'équation (2.4.10) est équivalente à :

$$r^2 = \frac{2}{7}(3\lambda_2 - \lambda_1) \quad (2.4.13)$$

Or $3\lambda_2 - \lambda_1 = 2 - 5\gamma > 0 \Leftrightarrow \gamma < \frac{2}{5}$ donc c'est équivalent à

$$r = \sqrt{\frac{2}{7}(3\lambda_2 - \lambda_1)} \text{ et } \gamma < \frac{2}{5} \quad (2.4.14)$$

- Si k est impair alors $\cos(4\theta) = -1$ et l'équation (2.4.7) est équivalente à :

$$r^2 = \frac{4\lambda_1 - 3y_2^2}{2} \quad (2.4.15)$$

L'équation (2.4.4) est alors équivalente à :

$$y_2(12\lambda_1 - 8y_2^2 - 4\lambda_2) = 0 \quad (2.4.16)$$

- Si $y_2 = 0$ l'équation (2.4.15) est équivalente à

$$r = \sqrt{2\lambda_1} \text{ et } \gamma < 1 \quad (2.4.17)$$

- Si $y_2^2 = \frac{1}{2}(3\lambda_1 - \lambda_2)$ alors on doit avoir $3\lambda_1 - \lambda_2 = 2 - \gamma > 0 \Leftrightarrow \gamma < 2$. On remplace l'expression de y_2^2 alors l'équation (2.4.15) est équivalente à :

$$r^2 = \frac{1}{4}(3\lambda_2 - \lambda_1) \quad (2.4.18)$$

Or $3\lambda_2 - \lambda_1 = 2 - 5\gamma > 0 \Leftrightarrow \gamma < \frac{2}{5}$ donc c'est équivalent à

$$r = \sqrt{\frac{1}{4}(3\lambda_2 - \lambda_1)} \text{ et } \gamma < \frac{2}{5} \quad (2.4.19)$$

Maintenant que nous savons pour quelles valeurs de γ nous avons des solutions dans le cas où $r \neq 0$, donnons l'expression de ces solutions suivant les valeurs de θ et y_2 .

Posons

$$\begin{aligned} a &= \sqrt{3\lambda_2 - \lambda_1} = \sqrt{2 - 5\gamma} \\ b &= \sqrt{6\lambda_1 - 4\lambda_2} = \sqrt{2 + 2\gamma} \\ c &= \sqrt{3\lambda_1 - \lambda_2} = \sqrt{2 - \gamma} \end{aligned} \quad (2.4.20)$$

Comme $y_1 = r e^{i\theta}$, $y_3 = \overline{y_1}$ et avec la proposition 2.1.9 on a :

- pour $\gamma < 1$, en utilisant les formules (2.4.12) et (2.4.17), on obtient le tableau suivant :

	y_1	y_3	(x_1, x_2, x_3, x_4)
$\theta = 0, y_2 = 0$	$\sqrt{\lambda_1}$	$\sqrt{\lambda_1}$	$(0, -\sqrt{\lambda_1}, 0, \sqrt{\lambda_1})$
$\theta = \frac{\pi}{4}, y_2 = 0$	$e^{i\frac{\pi}{4}} \sqrt{2\lambda_1}$	$e^{-i\frac{\pi}{4}} \sqrt{2\lambda_1}$	$(\sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1})$
$\theta = \frac{\pi}{2}, y_2 = 0$	$i\sqrt{\lambda_1}$	$-i\sqrt{\lambda_1}$	$(\sqrt{\lambda_1}, 0, -\sqrt{\lambda_1}, 0)$
$\theta = \frac{3\pi}{4}, y_2 = 0$	$e^{i\frac{3\pi}{4}} \sqrt{2\lambda_1}$	$e^{-i\frac{3\pi}{4}} \sqrt{2\lambda_1}$	$(\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1})$
$\theta = \pi, y_2 = 0$	$-\sqrt{\lambda_1}$	$-\sqrt{\lambda_1}$	$(0, \sqrt{\lambda_1}, 0, -\sqrt{\lambda_1})$
$\theta = \frac{5\pi}{4}, y_2 = 0$	$e^{i\frac{5\pi}{4}} \sqrt{2\lambda_1}$	$e^{-i\frac{5\pi}{4}} \sqrt{2\lambda_1}$	$(-\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1})$
$\theta = \frac{3\pi}{2}, y_2 = 0$	$-i\sqrt{\lambda_1}$	$i\sqrt{\lambda_1}$	$(-\sqrt{\lambda_1}, 0, \sqrt{\lambda_1}, 0)$
$\theta = \frac{7\pi}{4}, y_2 = 0$	$e^{i\frac{7\pi}{4}} \sqrt{2\lambda_1}$	$e^{-i\frac{7\pi}{4}} \sqrt{2\lambda_1}$	$(-\sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1})$

- pour $\gamma < \frac{2}{5}$, en utilisant les formules (2.4.14) et (2.4.19), on obtient le tableau suivant :

	y_1	y_3	(x_1, x_2, x_3, x_4)
$\theta = 0, y_2 = \pm \sqrt{\frac{2}{7}}b$	$\sqrt{\frac{2}{7}}a$	$\sqrt{\frac{2}{7}}a$	$\sqrt{\frac{2}{7}}(\mp \frac{1}{2}b, -a \pm \frac{1}{2}b, \mp \frac{1}{2}b, a \pm \frac{1}{2}b)$
$\theta = \frac{\pi}{4}, y_2 = \pm \sqrt{\frac{1}{2}}c$	$\frac{1}{2} e^{i\frac{\pi}{4}} a$	$\frac{1}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}} a$	$\frac{\sqrt{2}}{4}(a \mp c, -a \pm c, -a \mp c, a \pm c)$
$\theta = \frac{\pi}{2}, y_2 = \pm \sqrt{\frac{2}{7}}b$	$i\sqrt{\frac{2}{7}}a$	$-i\sqrt{\frac{2}{7}}a$	$\sqrt{\frac{2}{7}}(a \mp \frac{1}{2}b, \pm \frac{1}{2}b, -a \mp \frac{1}{2}b, \pm \frac{1}{2}b)$
$\theta = \frac{3\pi}{4}, y_2 = \pm \sqrt{\frac{1}{2}}c$	$\frac{1}{2} e^{i\frac{3\pi}{4}} a$	$\frac{1}{2} e^{-i\frac{3\pi}{4}} a$	$\frac{\sqrt{2}}{4}(a \mp c, a \pm c, -a \mp c, -a \pm c)$
$\theta = \pi, y_2 = \pm \sqrt{\frac{2}{7}}b$	$-\sqrt{\frac{2}{7}}a$	$-\sqrt{\frac{2}{7}}a$	$\sqrt{\frac{2}{7}}(\mp \frac{1}{2}b, a \pm \frac{1}{2}b, \mp \frac{1}{2}b, -a \pm \frac{1}{2}b)$
$\theta = \frac{5\pi}{4}, y_2 = \pm \sqrt{\frac{1}{2}}c$	$\frac{1}{2} e^{i\frac{5\pi}{4}} a$	$\frac{1}{2} e^{-i\frac{5\pi}{4}} a$	$\frac{\sqrt{2}}{4}(-a \mp c, a \pm c, a \mp c, -a \pm c)$
$\theta = \frac{3\pi}{2}, y_2 = \pm \sqrt{\frac{2}{7}}b$	$-i\sqrt{\frac{2}{7}}a$	$i\sqrt{\frac{2}{7}}a$	$\sqrt{\frac{2}{7}}(-a \mp \frac{1}{2}b, \pm \frac{1}{2}b, a \mp \frac{1}{2}b, \pm \frac{1}{2}b)$
$\theta = \frac{7\pi}{4}, y_2 = \pm \sqrt{\frac{1}{2}}c$	$\frac{1}{2} e^{i\frac{7\pi}{4}} a$	$\frac{1}{2} e^{-i\frac{7\pi}{4}} a$	$\frac{\sqrt{2}}{4}(-a \mp c, -a \pm c, a \mp c, a \pm c)$

2.4.3 Étude des indices de selle

Maintenant il faut étudier ces point critiques pour déterminer leur indice. En utilisant la formule (2.1.19), les coefficients de la matrice hessienne H sont :

$$\begin{aligned}
 H(1,1) &= -\lambda_1 - \lambda_2 + 3|y_1|^2 + \frac{3}{2}y_2^2 + 3y_2 \operatorname{Re}((1+i)y_1) \\
 H(2,2) &= \frac{3}{2}(y_1^2 + y_2^2 + y_3^2) + 3|y_1|^2 - 2\lambda_1 \\
 H(3,3) &= -\lambda_1 - \lambda_2 + 3|y_1|^2 + \frac{3}{2}y_2^2 + 3y_2 \operatorname{Re}((1-i)y_1) \\
 H(1,2) = H(2,1) = H(2,3) = H(3,2) &= -\lambda_1 + \frac{3}{4}(y_1^2 + y_2^2 + y_3^2) + 3 \operatorname{Re}(y_1)y_2 + \frac{3}{2}|y_1|^2 \\
 H(1,3) = H(3,1) &= -\lambda_2 + \frac{3}{4}(y_1^2 + y_2^2 + y_3^2) + 3 \operatorname{Re}(y_1)y_2 + \frac{3}{2}|y_1|^2
 \end{aligned} \tag{2.4.21}$$

Alors pour :

- $y_1 = y_2 = y_3 = 0$ on a

$$H_{(y_1, y_2, y_3)} = \begin{bmatrix} -2 + 3\gamma & -1 + \gamma & -1 + 2\gamma \\ -1 + \gamma & -2 + 2\gamma & -1 + \gamma \\ -1 + 2\gamma & -1 + \gamma & -2 + 3\gamma \end{bmatrix} \tag{2.4.22}$$

En calculant le polynôme caractéristique, puis en résolvant l'équation de degré 3, on obtient que les valeurs propres de la matrice hessienne sont

$$\begin{aligned}
 X_1 &= \gamma - 1 \\
 X_2 &= \frac{1}{2}(7\gamma - 5 + \sqrt{17\gamma^2 - 22\gamma + 9}) \\
 X_3 &= \frac{1}{2}(7\gamma - 5 - \sqrt{17\gamma^2 - 22\gamma + 9})
 \end{aligned} \tag{2.4.23}$$

En étudiant le signe des valeurs propres, on obtient que pour

- $\gamma \in [0, \frac{1}{2}[$, l'indice de selle est 3,
- $\gamma \in]\frac{1}{2}, 1[$, l'indice de selle est 2,
- $\gamma \in]1, +\infty[$, l'indice de selle est 0.
- $y_1 = y_3 = 0$ et $y_2 = \pm 2\sqrt{\lambda_2}$ on a

$$H_{(y_1, y_2, y_3)} = \begin{bmatrix} 4 - 9\gamma & 2 - 5\gamma & 2 - 4\gamma \\ 2 - 5\gamma & 4 - 10\gamma & 2 - 5\gamma \\ 2 - 4\gamma & 2 - 5\gamma & 4 - 9\gamma \end{bmatrix} \tag{2.4.24}$$

En calculant le polynôme caractéristique, puis en résolvant l'équation de degré 3, on obtient que les valeurs propres de la matrice hessienne sont

$$\begin{aligned} X_1 &= 2 - 5\gamma \\ X_2 &= \frac{1}{2}(10 - 23\gamma - \sqrt{209\gamma^2 - 172\gamma + 36}) \\ X_3 &= \frac{1}{2}(10 - 23\gamma + \sqrt{209\gamma^2 - 172\gamma + 36}) \end{aligned} \quad (2.4.25)$$

En étudiant le signe des valeurs propres, on obtient que pour

- $\gamma \in [0, \frac{2}{5}[$, l'indice de selle est 0,
- $\gamma \in]\frac{2}{5}, \frac{1}{2}[$, l'indice de selle est 2.
- $y_1 = \pm\sqrt{\lambda_1}$, $y_3 = \pm\sqrt{\lambda_1}$ et $y_2 = 0$ on a

$$H_{(y_1, y_2, y_3)} = \begin{bmatrix} 1 & 2 - 2\gamma & 2 - \gamma \\ 2 - 2\gamma & 4 - 4\gamma & 2 - 2\gamma \\ 2 - \gamma & 2 - 2\gamma & 1 \end{bmatrix} \quad (2.4.26)$$

En calculant le polynôme caractéristique, puis en résolvant l'équation de degré 3, on obtient que les valeurs propres de la matrice hessienne sont

$$\begin{aligned} X_1 &= \gamma - 1 \\ X_2 &= \frac{1}{2}(7 - 5\gamma + \sqrt{41\gamma^2 - 70\gamma + 33}) \\ X_3 &= \frac{1}{2}(7 - 5\gamma - \sqrt{41\gamma^2 - 70\gamma + 33}) \end{aligned} \quad (2.4.27)$$

En étudiant le signe des valeurs propres, on obtient que pour $\gamma \in [0, 1[$, l'indice de selle est 1.

- $y_1 = \pm i\sqrt{\lambda_1}$, $y_3 = \mp i\sqrt{\lambda_1}$ et $y_2 = 0$ on a

$$H_{(y_1, y_2, y_3)} = \begin{bmatrix} 1 & -1 + \gamma & -1 + 2\gamma \\ -1 + \gamma & -2 + 2\gamma & -1 + \gamma \\ -1 + 2\gamma & -1 + \gamma & 1 \end{bmatrix} \quad (2.4.28)$$

En calculant le polynôme caractéristique, puis en résolvant l'équation de degré 3, on obtient que les valeurs propres de la matrice hessienne sont

$$\begin{aligned} X_1 &= 2(1 - \gamma) \\ X_2 &= 2\gamma - 1 - \sqrt{2\gamma^2 - 4\gamma + 3} \\ X_3 &= 2\gamma - 1 + \sqrt{2\gamma^2 - 4\gamma + 3} \end{aligned} \quad (2.4.29)$$

En étudiant le signe des valeurs propres, on obtient que pour $\gamma \in [0, 1[$, l'indice de selle est 1.

- $y_1 = e^{i\theta} \sqrt{2\lambda_1}$, $y_3 = e^{-i\theta} \sqrt{2\lambda_1}$, $\theta \in \{\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}\}$ et $y_2 = 0$ on a

$$H_{(y_1, y_2, y_3)} = \begin{bmatrix} 4 - 3\gamma & 2 - 2\gamma & 2 - \gamma \\ 2 - 2\gamma & 4 - 4\gamma & 2 - 2\gamma \\ 2 - \gamma & 2 - 2\gamma & 4 - 3\gamma \end{bmatrix} \quad (2.4.30)$$

En calculant le polynôme caractéristique, puis en résolvant l'équation de degré 3, on obtient que les valeurs propres de la matrice hessienne sont

$$\begin{aligned} X_1 &= 2(1 - \gamma) \\ X_2 &= 5 - 4\gamma + \sqrt{8\gamma^2 - 16\gamma + 9} \\ X_3 &= 5 - 4\gamma - \sqrt{8\gamma^2 - 16\gamma + 9} \end{aligned} \quad (2.4.31)$$

En étudiant le signe des valeurs propres, on obtient que pour $\gamma \in [0, 1[$, l'indice de selle est 0.

- $(y_1, y_2, y_3) = (e^{i\theta} \sqrt{\frac{2}{7}}a, \pm \sqrt{\frac{2}{7}}b, e^{-i\theta} \sqrt{\frac{2}{7}}a)$, avec $\theta \in \{0, \pi\}$ on a

$$H_{(y_1, y_2, y_3)} = \begin{bmatrix} \frac{4}{7} - \frac{3}{7}\gamma + \frac{6}{49}K & \frac{8}{7} - \frac{20}{7}\gamma + \frac{6}{49}K & \frac{8}{7} - \frac{13}{7}\gamma + \frac{6}{49}K \\ \frac{8}{7} - \frac{20}{7}\gamma + \frac{6}{49}K & \frac{16}{7} - \frac{40}{7}\gamma & \frac{8}{7} - \frac{20}{7}\gamma + \frac{6}{49}K \\ \frac{8}{7} - \frac{13}{7}\gamma + \frac{6}{49}K & \frac{8}{7} - \frac{20}{7}\gamma + \frac{6}{49}K & \frac{4}{7} - \frac{3}{7}\gamma + \frac{6}{49}K \end{bmatrix} \quad (2.4.32)$$

où $K = \pm e^{i\theta} \sqrt{(7+7\gamma)(28-70\gamma)}$ avec le \pm en accord avec la valeur de y_2 .

En calculant le polynôme caractéristique, puis en résolvant l'équation de degré 3, on obtient que les valeurs propres de la matrice hessienne sont

$$\begin{aligned} X_1 &= \frac{1}{7}(10\gamma - 4) \\ X_2 &= -4\gamma + 2 + \frac{6}{49}K + \frac{2}{7}\sqrt{-34\gamma^2 - 334\gamma - 12\gamma K + 141 + 6K} \\ X_3 &= -4\gamma + 2 + \frac{6}{49}K - \frac{2}{7}\sqrt{-34\gamma^2 - 334\gamma - 12\gamma K + 141 + 6K} \end{aligned} \quad (2.4.33)$$

En étudiant le signe des valeurs propres, on obtient que pour $\gamma \in [0, \frac{2}{5}]$, l'indice de selle est 2.

- $(y_1, y_2, y_3) = (e^{i\theta} \sqrt{\frac{2}{7}}a, \pm \sqrt{\frac{2}{7}}b, e^{-i\theta} \sqrt{\frac{2}{7}}a)$, avec $\theta \in \{\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\}$ on a

$$H_{(y_1, y_2, y_3)} = \begin{bmatrix} \frac{4}{7} - \frac{3}{7}\gamma - \frac{6}{49}K & -\frac{4}{7} + \frac{10}{7}\gamma & -\frac{4}{7} + \frac{17}{7}\gamma \\ -\frac{4}{7} + \frac{10}{7}\gamma & -\frac{8}{7} + \frac{20}{7}\gamma & -\frac{4}{7} + \frac{10}{7}\gamma \\ -\frac{4}{7} + \frac{17}{7}\gamma & -\frac{4}{7} + \frac{10}{7}\gamma & \frac{4}{7} - \frac{3}{7}\gamma + \frac{6}{49}K \end{bmatrix} \quad (2.4.34)$$

où $K = \pm e^{i\theta - \frac{\pi}{2}} \sqrt{(7+7\gamma)(28-70\gamma)}$ avec le \pm en accord avec la valeur de y_2 .

En calculant le polynôme caractéristique, puis en résolvant l'équation de degré 3, on obtient que les valeurs propres de la matrice hessienne sont

$$\begin{aligned} X_1 &= \frac{4}{21} \operatorname{Re}(L^{\frac{1}{3}}) + \frac{2}{3}\gamma \\ X_2 &= -\frac{2}{21}(\operatorname{Re}(L^{\frac{1}{3}}) - \operatorname{Im}(L^{\frac{1}{3}})) + \frac{2}{3}\gamma \\ X_3 &= -\frac{2}{21}(\operatorname{Re}(L^{\frac{1}{3}}) + \operatorname{Im}(L^{\frac{1}{3}})) + \frac{2}{3}\gamma \end{aligned} \quad (2.4.35)$$

où

$$\begin{aligned} L &= -4158\gamma + 11683\gamma^3 - 3591\gamma^2 + 1512 + 3i(393984 + 18107820\gamma^2 \\ &\quad - 4240512\gamma + 33308355\gamma^4 - 37392204\gamma^3 - 13831500\gamma^6 + 198300\gamma^5)^{\frac{1}{2}} \end{aligned} \quad (2.4.36)$$

En étudiant le signe des valeurs propres, on obtient que pour $\gamma \in [0, \frac{2}{5}]$, l'indice de selle est 2.

- $(y_1, y_2, y_3) = (\frac{1}{2} e^{i\theta} a, \pm \sqrt{\frac{1}{2}}c, \frac{1}{2} e^{-i\theta} a)$, avec $\theta \in \{\frac{\pi}{4}, \frac{3\pi}{4}, \frac{5\pi}{4}, \frac{7\pi}{4}\}$ on a

$$H_{(y_1, y_2, y_3)} = \begin{bmatrix} -\frac{3}{2}\gamma + 1 + \frac{3}{4}K_2\delta_1 & -\frac{5}{4}\gamma + \frac{1}{2} + \frac{3}{8}K_2 & -\frac{1}{4}\gamma + \frac{1}{2} + \frac{3}{8}K_2 \\ -\frac{5}{4}\gamma + \frac{1}{2} + \frac{3}{8}K_2 & -\frac{5}{2}\gamma + 1 & -\frac{5}{4}\gamma + \frac{1}{2} + \frac{3}{8}K_2 \\ -\frac{1}{4}\gamma + \frac{1}{2} + \frac{3}{8}K_2 & -\frac{5}{4}\gamma + \frac{1}{2} + \frac{3}{8}K_2 & -\frac{3}{2}\gamma + 1 + \frac{3}{4}K_2\delta_2 \end{bmatrix} \quad (2.4.37)$$

où

$$\begin{aligned} K_2 &= \pm (\delta_{\theta, \frac{\pi}{4}} + \delta_{\theta, \frac{7\pi}{4}} - \delta_{\theta, \frac{3\pi}{4}} - \delta_{\theta, \frac{5\pi}{4}}) \sqrt{(8-4\gamma)(2-5\gamma)} \\ \delta_1 &= \delta_{\theta, \frac{3\pi}{4}} + \delta_{\theta, \frac{7\pi}{4}} \\ \delta_2 &= \delta_{\theta, \frac{\pi}{4}} + \delta_{\theta, \frac{5\pi}{4}} \end{aligned} \quad (2.4.38)$$

avec le \pm en accord avec la valeur de y_2 .

En calculant le polynôme caractéristique puis en résolvant l'équation de degré 3, on obtient les valeurs propres de la matrice hessienne, dont on ne donnera pas l'expression vu l'écriture complexe qu'elles possèdent. Puis en étudiant le signe des valeurs propres, on obtient que pour $\gamma \in [0, \frac{2}{5}[$, l'indice de selle est 1.

2.4.4 Étude des liaisons

Pour démontrer que le graphe des liaisons est bien celui que nous prétendons, il suffit de démontrer que nous avons les deux types de liens suivants :

- de $(\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1})$ vers $(-\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1})$ passant par $(0, \sqrt{\lambda_1}, 0, -\sqrt{\lambda_1})$,
- de $(\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1})$ vers $(\sqrt{\lambda_2}, -\sqrt{\lambda_2}, \sqrt{\lambda_2}, -\sqrt{\lambda_2})$ passant par $\frac{\sqrt{2}}{4}(a+c, a-c, -a+c, -a-c)$,

les autres s'en déduisent du fait des symétrie du potentiel V (celles énoncées dans la démonstration de la proposition 2.2.1).

Commençons par le premier lien. Soit $t \in [0, 1]$ et considérons le chemin linéaire Γ_1 défini par :

$$\Gamma_1(t) = ((1-2t)\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, (2t-1)\sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1}) \quad (2.4.39)$$

Remarquons que ce chemin respecte bien la contrainte et passe bien par tous les points :

$$\begin{aligned} \Gamma_1(0) &= (\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1}) \\ \Gamma_1\left(\frac{1}{2}\right) &= (0, \sqrt{\lambda_1}, 0, -\sqrt{\lambda_1}) \\ \Gamma_1(1) &= (-\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1}) \end{aligned} \quad (2.4.40)$$

Il nous faut donc montrer que la fonction $V \circ \Gamma_1$ est croissante sur $[0, \frac{1}{2}]$ puis décroissante sur $[\frac{1}{2}, 1]$. En développant l'expression de $V \circ \Gamma_1$, puis en dérivant on a

$$(V \circ \Gamma_1)'(t) = 16t(2t-1)(t-1)(\gamma-1)^2 \quad (2.4.41)$$

Donc on en déduit bien que la fonction $V \circ \Gamma_1$ est croissante sur $[0, \frac{1}{2}]$ puis décroissante sur $[\frac{1}{2}, 1]$ pour tout $\gamma \in [0, \frac{2}{5}[$ (et pas que $\gamma \in [0, \frac{1}{4}(3-\sqrt{2})]$), alors le graphe des liaisons possède bien le premier type de lien.

Maintenant pour le deuxième type de lien, nous allons découper le chemin en deux, que nous noterons Γ_2 et Γ_3 , le premier pour aller de $(\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1}, -\sqrt{\lambda_1})$ à $\frac{\sqrt{2}}{4}(a+c, a-c, -a+c, -a-c)$ et le deuxième pour aller de $(\sqrt{\lambda_2}, -\sqrt{\lambda_2}, \sqrt{\lambda_2}, -\sqrt{\lambda_2})$ à $\frac{\sqrt{2}}{4}(a+c, a-c, -a+c, -a-c)$. En faisant cela il nous faudra démontrer que $V \circ \Gamma_2$ et $V \circ \Gamma_3$ sont des fonctions croissantes puis pour conclure il suffira de poser

$$\Gamma_4(t) = \begin{cases} \Gamma_2(2t) & \text{si } t \in [0, \frac{1}{2}] \\ \Gamma_3(2-2t) & \text{si } t \in [\frac{1}{2}, 1] \end{cases} \quad (2.4.42)$$

alors le chemin Γ_4 vérifiera les conditions de la définition 2.2.3 ce qui montrera le deuxième type de lien.

Commençons par Γ_3 . Soit $t \in [0, 1]$, on définit le chemin linéaire Γ_3 par :

$$\begin{aligned} \Gamma_3(t) &= \left((1-t)\sqrt{\lambda_2} + t\frac{\sqrt{2}}{4}(a+c), -(1-t)\sqrt{\lambda_2} + t\frac{\sqrt{2}}{4}(a-c) \right. \\ &\quad \left. , (1-t)\sqrt{\lambda_2} + t\frac{\sqrt{2}}{4}(-a+c), -(1-t)\sqrt{\lambda_2} + t\frac{\sqrt{2}}{4}(-a-c) \right) \end{aligned} \quad (2.4.43)$$

On veut montrer que la fonction $V \circ \Gamma_3$ est croissante, en développant l'expression de $V \circ \Gamma_3$, puis en dérivant on a

$$(V \circ \Gamma_3)'(t) = f_1(\gamma)t(t-1)(t-g_1(\gamma)) \quad (2.4.44)$$

où les fonctions f_1 et g_1 sont définies par

$$\begin{aligned} f_1(\gamma) &= \frac{111}{2}\gamma^2 - 64\gamma + 18 - 8(1-2\gamma)^{\frac{3}{2}}\sqrt{4-2\gamma} \\ g_1(\gamma) &= \frac{93\gamma^2 - 94\gamma + 24 - 8(1-2\gamma)^{\frac{3}{2}}\sqrt{4-2\gamma}}{111\gamma^2 - 128\gamma + 36 - 16(1-2\gamma)^{\frac{3}{2}}\sqrt{4-2\gamma}} \end{aligned} \quad (2.4.45)$$

En étudiant ces deux fonctions on obtient que

$$\begin{aligned} \forall \gamma \in [0, \frac{2}{5}[, f_1(\gamma) &> 0 \\ \forall \gamma \in [0, \frac{2}{5}[, g_1(\gamma) &\geq 2 \end{aligned} \quad (2.4.46)$$

Ainsi la fonction $V \circ \Gamma_3$ est croissante sur $[0, 1]$ pour tout $\gamma \in [0, \frac{2}{5}[$ (et pas que $\gamma \in [0, \frac{1}{4}(3 - \sqrt{2})]$). Enfin, il faut regarder Γ_2 . Soit $t \in [0, 1]$, on définit le chemin linéaire Γ_2 par :

$$\begin{aligned} \Gamma_2(t) &= \left((1-t)\sqrt{\lambda_1} + t\frac{\sqrt{2}}{4}(a+c), (1-t)\sqrt{\lambda_1} + t\frac{\sqrt{2}}{4}(a-c) \right. \\ &\quad \left. , -(1-t)\sqrt{\lambda_1} + t\frac{\sqrt{2}}{4}(-a+c), -(1-t)\sqrt{\lambda_1} + t\frac{\sqrt{2}}{4}(-a-c) \right) \end{aligned} \quad (2.4.47)$$

On veut montrer que la fonction $V \circ \Gamma_2$ est croissante, en développant l'expression de $V \circ \Gamma_2$, puis en dérivant on a

$$(V \circ \Gamma_2)'(t) = f_2(\gamma)t(t-1)(t-g_2(\gamma)) \quad (2.4.48)$$

où les fonctions f_2 et g_2 sont définies par

$$\begin{aligned} f_2(\gamma) &= \frac{51}{2}\gamma^2 - 44\gamma + 18 - 8(1-\gamma)^{\frac{3}{2}}\sqrt{4-10\gamma} \\ g_2(\gamma) &= \frac{27\gamma^2 - 50\gamma + 24 - 8(1-\gamma)^{\frac{3}{2}}\sqrt{4-10\gamma}}{51\gamma^2 - 88\gamma + 36 - 16(1-\gamma)^{\frac{3}{2}}\sqrt{4-10\gamma}} \end{aligned} \quad (2.4.49)$$

En étudiant ces deux fonctions on obtient que

$$\begin{aligned} \forall \gamma \in [0, \frac{2}{5}[, f_2(\gamma) &\geq 2, \\ \forall \gamma \in [0, \frac{1}{4}(3 - \sqrt{2})] , g_2(\gamma) &\geq 1. \end{aligned} \quad (2.4.50)$$

C'est ici qu'apparaît le point technique de $\frac{1}{4}(3 - \sqrt{2})$ car

$$\forall \gamma \in [\frac{1}{4}(3 - \sqrt{2}), \frac{2}{5}] , \frac{13}{14} \leq g_2(\gamma) \leq 1, \quad (2.4.51)$$

et dans ce cas, la fonction $V \circ \Gamma_2$ ne serait pas tout le temps croissante. Donc on peut conclure que la fonction $V \circ \Gamma_2$ est croissante sur $[0, 1]$ pour tout $\gamma \in [0, \frac{1}{4}(3 - \sqrt{2})]$, alors le graphe des liaisons possède bien le deuxième type de lien et cela termine la démonstration.

Chapitre 3

Étude de V_γ : dimension quelconque

Nous avons mené à bien dans le chapitre 2 précédent, l'étude des points critiques et des liaisons, dans le cas où $N \in \{2, 3, 4\}$. Or, on peut s'apercevoir qu'avec la méthode énoncée (transformée de Fourier discrète), qu'à partir de $N = 5$ les calculs sont difficiles à résoudre. Nous allons donc dans ce chapitre, donner dans une première section une méthode générale pour trouver les minima locaux et les selles d'indice 1 pour γ suffisamment petit, puis dans une deuxième section décrire les liaisons qu'il y a entre ces points critiques. Puis nous terminerons par une illustration non triviale de cette méthode en l'appliquant au cas où $N = 8$ (même si on s'apercevra que le graphe est difficilement réalisable avec les éléments que nous avons introduit jusqu'à présent).

3.1 Recherche des selles d'indice 0 et 1

3.1.1 Cas $\gamma = 0$

Avant de commencer l'étude générale des points critiques du potentiel V_γ (défini dans (2.0.1)) sous la contrainte, pour γ quelconque, nous allons nous intéresser au cas où $\gamma = 0$.

Pour faire cette étude, nous allons rappeler quelques notions sur les fonctions définies sur des sous-variétés de \mathbb{R}^n très connues en géométrie différentielle (voir [32]).

Définition 3.1.1. Soient E, F des espaces vectoriels de dimension finie et U un ouvert de E . Soit $f : U \rightarrow F$ une application de classe C^k . Un point $x \in U$ est appelé un point critique de f si son rang satisfait

$$\text{rg } d_a f < \dim F \quad (3.1.1)$$

Définition 3.1.2. Soient E, F des espaces vectoriels de dimensions finies et U un ouvert de E . Une application $f : U \rightarrow F$, de classe C^k est appelée une submersion si la différentielle $d_a f$ est surjective en tout point de U , autrement dit

$$\forall a \in U, \text{rg } d_a f = \dim F \quad (3.1.2)$$

Proposition 3.1.3. Soit U un ouvert de $E = \mathbb{R}^n$ et $g = (g_1, \dots, g_r) : U \rightarrow \mathbb{R}^r$ une submersion. On considère la sous-variété $M \subset U$ définie par les équations $g_1 = \dots = g_r = 0$.

Soit $f : U \rightarrow \mathbb{R}$ une application de classe C^k et $f|_M$ la restriction de f à la sous-variété M . Un point x de M est un point critique de $f|_M$ si et seulement s'il existe $(\lambda_1, \dots, \lambda_r) \in \mathbb{R}^r$ tel que x soit un point critique pour la fonction

$$f - \sum_{i=1}^r \lambda_i g_i \quad (3.1.3)$$

Donc, avec ces notations, dans notre cas si on considère la fonction g définie par

$$g : \begin{array}{ccc} \mathbb{R}^N & \rightarrow & \mathbb{R} \\ (x_1, \dots, x_N) & \mapsto & \sum_{i=1}^N x_i \end{array} \quad (3.1.4)$$

la sous-variété M est en fait S (voir (2.0.2)), et si on prend $f = V_0$ alors grâce à la proposition 3.1.3 précédente on a

$$x \in S \text{ est un point critique de } V_0|_S \Leftrightarrow \exists \lambda \in \mathbb{R}, x \in S \text{ est un point critique de } V_0 - \lambda g. \quad (3.1.5)$$

En remarquant que

$$\nabla g(x) = \mathbf{1}_N, \quad (3.1.6)$$

et en utilisant la définition 3.1.1 d'un point critique on peut réécrire la relation (3.1.5) de la façon suivante

$$x \in S \text{ est un point critique de } V_0|_S \Leftrightarrow \begin{cases} x \in S \\ \exists \lambda \in \mathbb{R}, \nabla V_0(x) = \lambda \mathbf{1}_N \end{cases} \quad (3.1.7)$$

En calculant $\nabla V_0(x)$ on peut réécrire la relation (3.1.7) de la façon suivante

$$x \in S \text{ est un point critique de } V_0|_S \Leftrightarrow \begin{cases} \sum_{i=1}^N x_i = 0 \\ \exists \lambda \in \mathbb{R}, \forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket, x_i^3 - x_i = \lambda \end{cases} \quad (3.1.8)$$

Donc chaque composante x_i , indépendamment les unes des autres, est une solution d'une équation de degré 3. Avant d'étudier (3.1.8) suivant les valeurs de $\lambda \in \mathbb{R}$, rappelons la méthode de Cardan pour la résolution d'équation de degré 3

Proposition 3.1.4. *Considérons l'équation suivante : $z^3 + pz + q = 0$ avec $p, q \in \mathbb{R}$. On pose $\Delta = -(4p^3 - 27q^2)$ le discriminant. Alors :*

1. si $\Delta < 0$ alors il y a une racine réelle et deux racines complexes,
2. si $\Delta = 0$ alors :
 - (a) si $p = q = 0$ alors 0 est solution triple
 - (b) sinon il y a deux racines réelles (une simple et une double)
3. si $\Delta > 0$ alors il y a trois racines réelles

$$z_k = 2\sqrt{\frac{-p}{3}} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(\frac{-q}{2} \sqrt{\frac{27}{-p^3}}\right) + \frac{2k\pi}{3}\right) \text{ pour } k \in \llbracket 0, 2 \rrbracket. \quad (3.1.9)$$

De plus

$$z_0 + z_1 + z_2 = 0. \quad (3.1.10)$$

Passons à l'étude de (3.1.8). Suivant les valeurs de $\lambda \in \mathbb{R}$, on a trois cas possibles :

1. si $\lambda \notin \left[-\frac{2}{3\sqrt{3}}, \frac{2}{3\sqrt{3}}\right]$ alors les composantes x_i n'ont qu'une solution réelle possible (non nulle), or $\sum_{i=1}^N x_i = 0$ donc c'est impossible.
2. si $\lambda = \pm \frac{2}{3\sqrt{3}}$ alors $x_i = \mp \frac{1}{\sqrt{3}}$ ou $x_i = \pm \frac{2}{\sqrt{3}}$, or $\sum_{i=1}^N x_i = 0$ donc le seul cas possible est quand N est un multiple de 3. On posera

$$\begin{aligned} a_0 &= 0, \quad a_1 = \text{card}\left(\left\{x_i = \mp \frac{2}{\sqrt{3}} \mid i \in \llbracket 1, N \rrbracket\right\}\right), \\ a_2 &= \text{card}\left(\left\{x_i = \pm \frac{1}{\sqrt{3}} \mid i \in \llbracket 1, N \rrbracket\right\}\right). \end{aligned} \quad (3.1.11)$$

3. si $\lambda \in \left]-\frac{2}{3\sqrt{3}}, \frac{2}{3\sqrt{3}}\right[$ le discriminant de l'équation de degré 3 de chaque composante x_i vaut

$$\Delta = -\left(\lambda^2 + \frac{4}{27}\right)1^3 = -\left(\lambda - \frac{2}{3\sqrt{3}}\right)\left(\lambda + \frac{2}{3\sqrt{3}}\right) > 0. \quad (3.1.12)$$

D'après le résultat de la proposition 3.1.4 il y a trois solutions réelles. Notons les solutions $S = \{\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2\}$ de manière que si on pose

$$a_k = \text{card}(\{x_i = \alpha_k \mid i \in \llbracket 1, N \rrbracket\}) \text{ pour } k \in \llbracket 0, 2 \rrbracket \quad (3.1.13)$$

on ait $a_0 \leq a_1 \leq a_2$.

- Étudions le cas $a_0 \neq a_2$.

Comme $\sum_{i=1}^N x_i = 0$, et par (3.1.10) on a $\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 = 0$, alors :

$$(a_1 - a_0)\alpha_1 + (a_2 - a_0)\alpha_2 = 0. \quad (3.1.14)$$

De plus

$$\alpha_0^3 - \alpha_0 = \alpha_1^3 - \alpha_1 = \alpha_2^3 - \alpha_2 \quad (3.1.15)$$

donc, en combinant (3.1.14) et (3.1.15), on cherche à résoudre

$$\alpha_1^3 - \alpha_1 = -\left(\frac{a_1 - a_0}{a_2 - a_0}\alpha_1\right)^3 + \left(\frac{a_1 - a_0}{a_2 - a_0}\alpha_1\right) \quad (3.1.16)$$

Comme $a_0 \neq a_2$ alors le cas $\alpha_1 = 0$ n'est pas possible car on ne pourrait pas avoir $\sum_{i=1}^N x_i = 0$.

En simplifiant par α_1 , en mettant tout ce qui dépendant de α_1 du même coté et le reste de l'autre coté, puis en simplifiant un peu, l'équation (3.1.16) est équivalente à

$$\alpha_1 = \pm(a_2 - a_0)\sqrt{\frac{a_2 + a_1 - 2a_0}{(a_1 - a_0)^3 + (a_2 - a_0)^3}} \quad (3.1.17)$$

En remplaçant α_1 par sa valeur dans (3.1.14) on obtient

$$\alpha_2 = \mp(a_1 - a_0)\sqrt{\frac{a_2 + a_1 - 2a_0}{(a_1 - a_0)^3 + (a_2 - a_0)^3}}. \quad (3.1.18)$$

Et comme $\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 = 0$, on en déduit la valeur de α_0 , donc :

$$\begin{cases} \alpha_2 = \mp(a_1 - a_0)\sqrt{\frac{a_2 + a_1 - 2a_0}{(a_1 - a_0)^3 + (a_2 - a_0)^3}} \\ \alpha_1 = \pm(a_2 - a_0)\sqrt{\frac{a_2 + a_1 - 2a_0}{(a_1 - a_0)^3 + (a_2 - a_0)^3}} \\ \alpha_0 = \mp(a_2 - a_1)\sqrt{\frac{a_2 + a_1 - 2a_0}{(a_1 - a_0)^3 + (a_2 - a_0)^3}} \end{cases} \quad (3.1.19)$$

Remarquons que dans le cas particulier où N est un multiple de 3 et

$$\alpha_0 = 0, \quad \alpha_1 = \frac{N}{3}, \quad \alpha_2 = \frac{2N}{3},$$

en utilisant (3.1.19) on retombe sur (3.1.11).

- Étudions le cas $a_0 = a_2$. On a alors $a_0 = a_1 = a_2$ et comme $\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 = 0$ on ne peut conclure comme précédemment. Or d'après le résultat de la proposition 3.1.4 on connaît l'expression explicite des solutions, qui sont pour $k \in [0, 2]$:

$$z_k = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos\left(\frac{1}{3} \arccos\left(\frac{\lambda 3\sqrt{3}}{2}\right) + \frac{2k\pi}{3}\right) \quad (3.1.20)$$

De plus $\lambda \in]-\frac{2}{3\sqrt{3}}, \frac{2}{3\sqrt{3}}[$ [donc $\frac{1}{3} \arccos\left(\frac{\lambda 3\sqrt{3}}{2}\right) \in]0, \frac{\pi}{3}[$] alors l'équation (3.1.20) est équivalente à

$$z_k = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos\left(\theta + \frac{2k\pi}{3}\right), \quad \theta \in]0, \frac{\pi}{3}[. \quad (3.1.21)$$

Remarquons que nous retrouvons bien, dans le cas où $N = 3$, la famille de points critiques. En effet le cas où $\theta = \frac{\pi}{3}$ on retombe sur le cas $\lambda = \pm\frac{2}{3\sqrt{3}}$ donc en combinant ce cas avec (3.1.21) on obtient

$$z_k = \frac{2}{\sqrt{3}} \cos\left(\theta + \frac{2k\pi}{3}\right), \quad \theta \in [0, 2\pi[. \quad (3.1.22)$$

Cette étude de cas, suivant les valeurs de $\lambda \in \mathbb{R}$, motive la définition suivante :

Définition 3.1.5. *A chaque point critique on associe le triplet critique (a_0, a_1, a_2) comme dans l'étude de cas précédente.*

Maintenant que nous avons trouvé les points critiques grâce à cette étude il nous faut déterminer l'indice de chacun de ces points.

Théorème 3.1.6 (Caractérisation des indices de selle des triplets critiques). *Dans le cas où N est un multiple de 3 :*

- si $a_1 = \frac{N}{3}$ et $a_0 < \frac{N}{3}$ alors c'est un point critique d'indice 0 avec $\frac{2N}{3} - 1$ valeurs propres nulles,
- si $a_0 = a_1 = a_2 = \frac{N}{3}$ alors c'est un point critique d'indice $\frac{N}{3} - 1$ avec 1 valeur propre nulle.

Dans le cas où $a_1 \neq \frac{N}{3}$ nous n'avons aucune valeur propre nulle et :

- si $2a_1 > a_0 + a_2$ alors c'est un point critique d'indice a_0 ,
- si $2a_1 < a_0 + a_2$ alors c'est un point critique d'indice $a_2 - 1$.

Démonstration. Soit $x \in \mathbb{R}^N$ un point critique de $V_\gamma|_S$ de triplet critique (a_0, a_1, a_2) . Pour savoir l'indice de ce point il nous faut donc étudier la signature de la matrice hessienne de \tilde{V}_0 (définie dans (2.0.11)) qui est

$$H\tilde{V}_0 = \begin{bmatrix} 3x_1^2 - 1 & & (0) \\ & \ddots & \\ & & 3x_{N-1}^2 - 1 \end{bmatrix} + \left(3 \left(\sum_{i=1}^{N-1} -x_i \right)^2 - 1 \right) \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \quad (3.1.23)$$

Or, nous savons par l'étude précédente, que chaque coordonnée $x_i \in \{\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2\}$. En faisant une permutation des coordonnées, et donc un changement de paramétrisation, nous obtenons une matrice H définie par

$$H = \begin{bmatrix} (3\alpha_0^2 - 1)\mathbf{1}_{a_0} & & (0) \\ & (3\alpha_1^2 - 1)\mathbf{1}_{a_1} & \\ (0) & & (3\alpha_2^2 - 1)\mathbf{1}_{a_2-1} \end{bmatrix} + (3\alpha_2^2 - 1) \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}, \quad (3.1.24)$$

qui est congrue à $H\tilde{V}_0$. De plus une propriété fondamentale de la signature des matrices quadratiques nous assure qu'elle est invariante pour les classes de congruence. Donc, étudier la signature de $H\tilde{V}_0$ est équivalent à étudier la signature de la matrice H .

Dans la suite, nous allons étudier la signature suivant les valeurs de a_0, a_1, a_2 et grâce à la remarque précédente nous étudierons la signature de la matrice H définie par (3.1.24) ou bien un autre changement de coordonnée pour nous simplifier la tâche suivant les cas.

Les différents cas sont :

1. $(a_0, a_1, a_2) = (0, 0, N)$. Nous avons $\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket$, $x_i = 0$ donc la matrice H vaut

$$H = \begin{bmatrix} -2 & & (-1) \\ & \ddots & \\ (-1) & & -2 \end{bmatrix}$$

On voit que les vecteurs $(e_1 - e_i)_{i \in \llbracket 2, N-1 \rrbracket}$ sont des vecteurs propres de H de valeur propre

-1 , et le vecteur $\sum_{i=1}^{N-1} e_i$ est aussi un vecteur propre de H de valeur propre $-N$.

Donc dans ce cas l'indice de selle est $N - 1$.

2. $a_0 = 0$ et $a_1 \geq 1$. En se servant des formules (3.1.19) et que $a_1 + a_2 = N$ nous avons

$$3\alpha_1^2 - 1 = \frac{N(2a_2 - a_1)}{a_1^2 + a_2(a_2 - a_1)}$$

$$3\alpha_2^2 - 1 = \frac{N(2a_1 - a_2)}{a_1^2 + a_2(a_2 - a_1)}$$

Nous avons alors deux sous-cas à traiter :

- si $a_1 = \frac{N}{3}$. Nous sommes dans le cas où N est un multiple de 3. On a $a_2 = \frac{2N}{3}$ et

$$\begin{aligned} 3\alpha_1^2 - 1 &= \frac{N(2a_2 - a_1)}{a_1^2 + a_2(a_2 - a_1)} > 0 \\ 3\alpha_2^2 - 1 &= 0 \end{aligned}$$

Donc la matrice H vaut

$$H = \begin{bmatrix} (3\alpha_1^2 - 1)\mathbb{1}_{a_1} & (0) \\ (0) & 0\mathbb{1}_{a_2-1} \end{bmatrix},$$

Donc l'indice de selle est 0 avec exactement $\frac{2N}{3} - 1$ valeurs propres nulles.

- si $a_1 \neq \frac{N}{3}$. On a

$$\begin{aligned} 3\alpha_1^2 - 1 &= \frac{N(2a_2 - a_1)}{a_1^2 + a_2(a_2 - a_1)} > 0 \\ 3\alpha_2^2 - 1 &= \frac{N(2a_1 - a_2)}{a_1^2 + a_2(a_2 - a_1)} \neq 0 \end{aligned}$$

On voit que les vecteurs $(e_1 - e_i)_{i \in \llbracket 2, a_1 \rrbracket}$ sont des vecteurs propres de H de valeur propre $3\alpha_1^2 - 1$, les vecteurs $(e_{a_1+1} - e_{a_1+1+i})_{i \in \llbracket 1, a_2-2 \rrbracket}$ sont des vecteurs propres de H de valeur propre $3\alpha_2^2 - 1$. Pour trouver les deux valeurs propres restantes remarquons que les vecteurs $\sum_{i=1}^{a_1} e_i$ et $\sum_{i=1}^{a_2-1} e_{a_1+i}$ forment un sous-espace stable par H . Donc les deux valeurs propres restantes sont les valeurs propres de la matrice M , induite à ce sous-espace, définie par

$$M = \begin{bmatrix} 3\alpha_1^2 - 1 + a_1(3\alpha_2^2 - 1) & (a_2 - 1)(3\alpha_2^2 - 1) \\ a_1(3\alpha_2^2 - 1) & a_2(3\alpha_2^2 - 1) \end{bmatrix}$$

En calculant le déterminant et la trace de M puis en les simplifiant on obtient

$$\begin{aligned} \det M &= \frac{2N^2(2a_1 - a_2)}{a_1^2 + a_2(a_2 - a_1)} \\ \text{Tr } M &= \frac{N(N + (N - 1)(2a_1 - a_2))}{a_1^2 + a_2(a_2 - a_1)} \end{aligned}$$

Comme $2a_1 - a_2 \neq 0$ car $a_1 \neq \frac{N}{3}$ nous pouvons conclure suivant le signe de $2a_1 - a_2$.

- * Si $2a_1 > a_2$ alors $\det M > 0$ et $\text{Tr } M > 0$ donc les deux valeurs propres de M sont strictement positives, de plus $3\alpha_1^2 - 1 > 0$ et $3\alpha_2^2 - 1 > 0$ donc c'est un point critique d'indice de selle 0 avec aucune valeur propre nulle.
- * Si $2a_1 < a_2$ alors $\det M < 0$ donc une des valeurs propres de M est strictement positive et l'autre strictement négative, de plus $3\alpha_1^2 - 1 > 0$ et $3\alpha_2^2 - 1 < 0$ donc c'est un point critique d'indice de selle -1 avec aucune valeur propre nulle.

3. $a_0 \geq 1$ et $a_0 \neq a_2$. En se servant des formules (3.1.19) puis en factorisant nous avons

$$\begin{aligned} 3\alpha_0^2 - 1 &= \frac{(2a_2 - a_1 - a_0)(a_0 - 2a_1 + a_2)}{(a_2 - \frac{a_1}{2} - \frac{a_0}{2})^2 + \frac{3}{4}(a_1 - a_0)^2} \\ 3\alpha_1^2 - 1 &= \frac{(2a_0 - a_1 - a_2)(a_0 + a_1 - 2a_2)}{(a_2 - \frac{a_1}{2} - \frac{a_0}{2})^2 + \frac{3}{4}(a_1 - a_0)^2} > 0 \\ 3\alpha_2^2 - 1 &= \frac{(2a_0 - a_1 - a_2)(a_0 - 2a_1 + a_2)}{(a_2 - \frac{a_1}{2} - \frac{a_0}{2})^2 + \frac{3}{4}(a_1 - a_0)^2} \end{aligned}$$

On remarque que $a_0 - 2a_1 + a_2 = 0 \Leftrightarrow a_1 = \frac{N}{3}$, qui est donc possible uniquement quand N est un multiple de 3. Nous avons alors les sous-cas suivants

- si $a_1 = \frac{N}{3}$ alors $3\alpha_0^2 - 1 = 3\alpha_2^2 - 1 = 0$, nous avons donc un point critique d'indice 0 avec exactement $\frac{2N}{3} - 1$ valeurs propres nulles ;

- si $a_1 \neq \frac{N}{3}$. Nous allons considérer la matrice H définie par

$$H = \begin{bmatrix} (3\alpha_0^2 - 1)\mathbb{1}_{a_0} & & (0) \\ & (3\alpha_2^2 - 1)\mathbb{1}_{a_2} & \\ (0) & & (3\alpha_1^2 - 1)\mathbb{1}_{a_1-1} \end{bmatrix} + (3\alpha_1^2 - 1) \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}.$$

On voit que les vecteurs $(e_1 - e_i)_{i \in \llbracket 2, a_0 \rrbracket}$ sont des vecteurs propres de H de valeur propre $3\alpha_0^2 - 1$, les vecteurs $(e_{a_0+1} - e_{a_0+1+i})_{i \in \llbracket 1, a_2-1 \rrbracket}$ sont des vecteurs propres de H de valeur propre $3\alpha_2^2 - 1$ et les vecteurs $(e_{a_0+a_2+1} - e_{a_0+a_2+1+i})_{i \in \llbracket 1, a_1-2 \rrbracket}$ sont des vecteurs propres de H de valeur propre $3\alpha_1^2 - 1$. Pour trouver les trois valeurs propres restantes remarquons

que les vecteurs $\sum_{i=1}^{a_0} e_i$, $\sum_{i=1}^{a_2} e_{a_0+i}$ et $\sum_{i=1}^{a_1-1} e_{a_0+a_2+i}$ forment un sous-espace stable par H .

Donc les trois valeurs propres restantes sont les valeurs propres de la matrice M , induite à ce sous-espace, définie par

$$M = \begin{bmatrix} 3\alpha_0^2 - 1 + a_0(3\alpha_1^2 - 1) & a_2(3\alpha_1^2 - 1) & (a_1 - 1)(3\alpha_1^2 - 1) \\ a_0(3\alpha_1^2 - 1) & 3\alpha_2^2 - 1 + a_2(3\alpha_1^2 - 1) & (a_1 - 1)(3\alpha_1^2 - 1) \\ a_0(3\alpha_1^2 - 1) & a_2(3\alpha_1^2 - 1) & a_1(3\alpha_1^2 - 1) \end{bmatrix}$$

En calculant le déterminant et la trace de M puis en les simplifiant on obtient

$$\det M = \frac{2(a_0 + a_1 - 2a_2)^2(2a_0 - a_1 - a_2)^2(a_0 - 2a_1 + a_2)}{(a_2 - \frac{a_1}{2} - \frac{a_0}{2})^2 + \frac{3}{4}(a_1 - a_0)^2}$$

$$\text{Tr } M = \frac{(a_0 - 2a_1 + a_2)^2 + N(-2a_0 + a_1 + a_2)(-a_0 - a_1 + 2a_2)}{(a_2 - \frac{a_1}{2} - \frac{a_0}{2})^2 + \frac{3}{4}(a_1 - a_0)^2} > 0$$

Comme $a_0 - 2a_1 + a_2 \neq 0$ car $a_1 \neq \frac{N}{3}$ nous pouvons conclure suivant le signe de $a_0 - 2a_1 + a_2$.

- * Si $a_0 - 2a_1 + a_2 < 0$ alors $\det M < 0$ et comme $\text{Tr } M > 0$ la matrice M possède deux valeurs propres strictement positives et une strictement négative. De plus on a $3\alpha_0^2 - 1 < 0$, $3\alpha_1^2 - 1 > 0$ et $3\alpha_2^2 - 1 > 0$, c'est donc un point critique d'indice de selle a_0 avec toutes ses valeurs propres non nulles.
- * Si $a_0 - 2a_1 + a_2 > 0$ alors $\det M > 0$ et comme $\text{Tr } M > 0$ il nous faut le coefficient de degré 1 du polynôme caractéristique pour conclure. En le calculant et faisant la bonne factorisation on obtient

$$\prod_{1 \leq i < j \leq 3} \lambda_i \lambda_j = \frac{n^2}{4}(4a_0 + a_1 + a_2 - 1) + \frac{3n}{2}(a_2 - a_1)(a_2 - a_1 + 1) + \frac{9}{4}(a_2 + a_1 - 1)(a_2 - a_1)^2$$

où les λ_i sont les valeurs propres de M et

$$n = -2a_0 + a_1 + a_2.$$

On remarque alors que $\prod_{1 \leq i < j \leq 3} \lambda_i \lambda_j > 0$. Et comme $\det M > 0$ est le produit des valeurs

propres et $\text{Tr } M > 0$ est la somme des valeurs propres, on peut conclure que les valeurs propres de M sont toutes strictement positives. De plus on a $3\alpha_0^2 - 1 > 0$, $3\alpha_1^2 - 1 > 0$ et $3\alpha_2^2 - 1 < 0$, c'est donc un point critique d'indice de selle $a_2 - 1$ avec toutes ses valeurs propres non nulles.

4. $a_0 \geq 1$ et $a_0 = a_2$, donc $a_0 = a_1 = a_2 = \frac{N}{3}$ qui est possible uniquement si N est un multiple de 3. En utilisant les relations (3.1.21), on a

$$3\alpha_0^2 - 1 = 2 \cos(2\theta) + 1 > 0$$

$$3\alpha_1^2 - 1 = 2 \cos(2\theta + \frac{4\pi}{3}) + 1 > 0$$

$$3\alpha_2^2 - 1 = 2 \cos(2\theta - \frac{4\pi}{3}) + 1 < 0,$$

avec $\theta \in]0, \frac{\pi}{3}[$. Nous allons distinguer deux sous-cas.

* Si $N = 3$. Donc la matrice H vaut

$$H = \begin{bmatrix} 3\alpha_0^2 - 1 + 3\alpha_2^2 - 1 & 3\alpha_2^2 - 1 \\ 3\alpha_2^2 - 1 & 3\alpha_1^2 - 1 + 3\alpha_2^2 - 1 \end{bmatrix}.$$

En calculant le déterminant et la trace de h , puis en simplifiant, on obtient :

$$\begin{aligned} \det M &= 0 \\ \text{Tr } M &= -2 \cos(\theta)^2 + 5 - 2\sqrt{3} \sin(\theta) \cos(\theta) < 0. \end{aligned}$$

C'est donc un point critique d'indice de selle 1 avec une valeur propre nulle.

* Si $N \geq 6$ et multiple de 3. Nous allons considérer la matrice H définie par

$$H = \begin{bmatrix} (3\alpha_0^2 - 1)\mathbb{1}_{\frac{N}{3}} & & (0) \\ & (3\alpha_2^2 - 1)\mathbb{1}_{\frac{N}{3}} & \\ (0) & & (3\alpha_1^2 - 1)\mathbb{1}_{\frac{N}{3}-1} \end{bmatrix} + (3\alpha_1^2 - 1) \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \cdots & 1 \end{bmatrix}.$$

On voit que les vecteurs $(e_1 - e_i)_{i \in [2, \frac{N}{3}]}$ sont des vecteurs propres de H de valeur propre $3\alpha_0^2 - 1$, les vecteurs $(e_{\frac{N}{3}+1} - e_{\frac{N}{3}+1+i})_{i \in [1, \frac{N}{3}-1]}$ sont des vecteurs propres de H de valeur propre $3\alpha_2^2 - 1$ et les vecteurs $(e_{\frac{2N}{3}+1} - e_{\frac{2N}{3}+1+i})_{i \in [1, \frac{N}{3}-2]}$ sont des vecteurs propres de H de valeur propre $3\alpha_1^2 - 1$. Pour trouver les trois valeurs propres restantes remarquons que les vecteurs $\sum_{i=1}^{\frac{N}{3}} e_i$, $\sum_{i=1}^{\frac{N}{3}} e_{\frac{N}{3}+i}$ et $\sum_{i=1}^{\frac{N}{3}-1} e_{\frac{2N}{3}+i}$ forment un sous-espace stable par H . Donc les trois valeurs propres restantes sont les valeurs propres de la matrice M , induite à ce sous-espace, définie par

$$M = \begin{bmatrix} 3\alpha_0^2 - 1 + \frac{N}{3}(3\alpha_1^2 - 1) & \frac{N}{3}(3\alpha_1^2 - 1) & (\frac{N}{3} - 1)(3\alpha_1^2 - 1) \\ \frac{N}{3}(3\alpha_1^2 - 1) & 3\alpha_2^2 - 1 + \frac{N}{3}(3\alpha_1^2 - 1) & (\frac{N}{3} - 1)(3\alpha_1^2 - 1) \\ \frac{N}{3}(3\alpha_1^2 - 1) & \frac{N}{3}(3\alpha_1^2 - 1) & \frac{N}{3}(3\alpha_1^2 - 1) \end{bmatrix}$$

En calculant le déterminant et la trace de M puis en les simplifiant on obtient

$$\begin{aligned} \det M &= 0 \\ \text{Tr } M &= -N(2 \cos(2\theta + \frac{\pi}{3}) - 1) - 2 \sin(2\theta + \frac{\pi}{6}) + 2 + 2 \cos(2\theta) > 0 \end{aligned}$$

Donc une des valeurs propres est nulle et une autre est positive. Pour conclure, il nous faut le coefficient de degré 1 du polynôme caractéristique. Si on note $\lambda_1 = 0, \lambda_2, \lambda_3$ les valeurs propres de M on a que $\lambda_2 \lambda_3$ est le coefficient de degré 1 du polynôme caractéristique d'où, en le calculant et simplifiant, on a

$$\begin{aligned} \lambda_2 \lambda_3 &= -2 \sin(\theta) \left(4\sqrt{3} \cos(\theta)^3 - \sqrt{3} \cos(\theta) - 2N\sqrt{3} \cos(\theta) \right. \\ &\quad \left. - 4 \sin(\theta) \cos(\theta)^2 - 2N \sin(\theta) + \sin(\theta) \right) > 0 \end{aligned}$$

Donc M possède une valeur propre nulle et deux valeurs propres strictement positives. De plus $3\alpha_0^2 - 1 > 0$, $3\alpha_1^2 - 1 > 0$ et $3\alpha_2^2 - 1 < 0$, c'est donc un point critique d'indice de selle $\frac{N}{3} - 1$ avec exactement une valeur propre nulle. □

3.1.2 Cas $\gamma > 0$

Dans la sous-section précédente nous avons donné une caractérisation complète des points critiques ainsi que leur indice pour $\gamma = 0$. Pour voir que cela est encore vrai pour $\gamma > 0$ suffisamment petit nous allons utiliser des arguments de perturbation.

Comme nous avons vu que seul les cas où N est un multiple de 3 sont des cas dégénérés (des valeurs propres de la matrice hessienne sont nulles) nous nous limiterons par la suite uniquement aux cas où N n'est pas un multiple de 3.

La première chose à faire est de montrer l'existence de solutions au problème

$$\nabla V_\gamma(x) - \lambda \mathbb{1}_N = 0. \quad (3.1.25)$$

Pour ce faire nous allons utiliser le théorème des fonctions implicites que nous rappelons.

Théorème 3.1.7. *Soient E, F et G trois espaces de Banach et f une fonction de classe C^p (respectivement analytique) définie sur U un ouvert de $E \times F$ et à valeur dans G . Soit $(x_0, y_0) \in U$ tel que $f(x_0, y_0) = 0$ et tel que le Jacobien de f par rapport à la deuxième variable (notée J_f^y) en (x_0, y_0) soit bicontinue de $F \rightarrow G$. Alors il existe un voisinage V de x_0 dans E , un voisinage W de y_0 dans F et une application $\varphi : V \rightarrow W$ de classe C^p (respectivement analytique) tels que $V \times W \subset U$ et*

$$\forall (x, y) \in V \times W, f(x, y) = 0 \Leftrightarrow \varphi(x) = y. \quad (3.1.26)$$

De plus si on note J_f^x le Jacobien de f par rapport à la première variable on a :

$$J_\varphi(x_0) = -J_f^y(x_0, \varphi(x_0))^{-1} J_f^x(x_0, \varphi(x_0)). \quad (3.1.27)$$

Soit x_0 un point critique de $V_0|_S$. On sait qu'il existe $\lambda \in \mathbb{R}$ tel que x_0 soit solution de $\nabla V_0(x) - \lambda \mathbb{1}_N = 0$. On va considérer la fonction $f : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ définie par

$$f(\gamma, x) = \nabla V_\gamma(x) - \lambda \mathbb{1}_N. \quad (3.1.28)$$

On a alors $f(0, x_0) = 0$ et en calculant $J_f^x(0, x_0)$ on obtient

$$J_f^x(0, x_0) = \begin{bmatrix} 3x_1^2 - 1 & & (0) \\ & \ddots & \\ (0) & & 3x_N^2 - 1 \end{bmatrix} \quad (3.1.29)$$

où $x_0 = (x_1, \dots, x_N)$. Or nous avons vu dans le théorème 3.1.6 que dans tous les cas où N n'est pas un multiple de 3 on a toujours

$$\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket, 3x_i^2 - 1 \neq 0. \quad (3.1.30)$$

Cela implique que la matrice $J_f^x(0, x_0)$ est inversible, et comme nous sommes dans le cas où E, F, G sont des espaces vectoriels de dimension finie ($E = \mathbb{R}, F = G = \mathbb{R}^N$), alors $J_f^x(0, x_0)$ est bien bicontinue. On peut alors appliquer le théorème des fonctions implicites, donc il existe un voisinage V de 0, un voisinage W de x_0 et une fonction $\varphi : V \rightarrow W$ tels que

$$\forall (x, y) \in V \times W, f(x, y) = 0 \Leftrightarrow \varphi(x) = y. \quad (3.1.31)$$

Autrement dit, il existe γ_{x_0} tel que pour $\gamma < \gamma_{x_0}$ le problème (3.1.25) admet bien des solutions, de plus avec (3.1.27) ses solutions sont de la forme

$$x = x_0 + \mathcal{O}(\gamma) \quad (3.1.32)$$

avec x_0 solution du problème (3.1.25) avec $\gamma = 0$, et nous les connaissons toutes grâce à l'étude réalisée dans la sous-section précédente qui sont en nombre fini, donc en notant $\tilde{\gamma}$ le minimum de tous les γ_{x_0} on aboutit bien que tous les points critiques de $V_\gamma|_S$ sont de la forme (3.1.32) pour tout x_0 point critique de $V_0|_S$.

Maintenant que nous savons ça, il nous faut montrer que, pour γ suffisamment petit, les points critiques gardent le même indice que dans le cas $\gamma = 0$, et sont encore non dégénérés. Nous aurons besoin d'un autre théorème de perturbation connu (voir [19]).

Théorème 3.1.8 (de Bauer-Fike (voir [19])). *Soit $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{C})$ une matrice diagonalisable et soit*

$$\mathcal{P} = \{P \in \text{GL}_n(\mathbb{C}) \mid P^{-1}AP = \text{diag}(\lambda_i)_{1 \leq i \leq n}\} \quad (3.1.33)$$

où $(\lambda_i)_{1 \leq i \leq n}$ sont les valeurs propres de A comptées avec leur multiplicité. Si $\delta A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{C})$ est une matrice de perturbation quelconque alors le spectre de $A + \delta A$ vérifie :

$$\text{Sp}(A + \delta A) \subset \bigcup_{i=1}^N D_i \quad (3.1.34)$$

où

$$D_i = \{z \in \mathbb{C} \mid |z - \lambda_i| \leq \tau(A)\|\delta A\|\} \quad (3.1.35)$$

avec $\tau(A) = \inf_{P \in \mathcal{P}} \|P\| \|P^{-1}\|$.

Dans notre cas nous voulons l'appliquer aux matrices hessiennes qui sont symétriques, or il y a une application directe du théorème 3.1.8 dans le cas des matrices symétriques ou hermitiennes.

Théorème 3.1.9 (voir [19]). *Soit $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ (respectivement $A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{C})$) une matrice symétrique (respectivement hermitienne) de valeurs propres $\alpha_1 \leq \alpha_2 \leq \dots \leq \alpha_n$ et soit $\delta A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{R})$ (respectivement $\delta A \in \mathcal{M}_n(\mathbb{C})$) une matrice de perturbation symétrique (respectivement hermitienne). Soient $\beta_1 \leq \beta_2 \leq \dots \leq \beta_n$ les valeurs propres de $A + \delta A$. Alors on a*

$$\forall k \in \llbracket 1, n \rrbracket, |\alpha_k - \beta_k| \leq \|\delta A\|_2. \quad (3.1.36)$$

Soit $x \in \mathbb{R}^N$ un point critique de $V_\gamma|_S$, donc il existe x_0 point critique de $V_0|_S$ tel que $x = x_0 + \mathcal{O}(\gamma)$ avec $\gamma \leq \tilde{\gamma}$. Montrons tout d'abord que la matrice hessienne de \tilde{V}_0 en x a la même signature que la matrice hessienne de \tilde{V}_0 en x_0 . Rappelons que la matrice hessienne de \tilde{V}_0 en x_0 est

$$H = \begin{bmatrix} (3\alpha_0^2 - 1)\mathbf{1}_{a_0} & & (0) \\ & (3\alpha_1^2 - 1)\mathbf{1}_{a_1} & \\ (0) & & (3\alpha_2^2 - 1)\mathbf{1}_{a_2-1} \end{bmatrix} + (3\alpha_2^2 - 1) \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix}, \quad (3.1.37)$$

(voir (3.1.24)) où (a_0, a_1, a_2) est le triplet critique de x_0 . Donc la matrice hessienne de \tilde{V}_0 en x est

$$\tilde{H} = H + \mathcal{O}(\gamma) \left(\begin{bmatrix} 6\alpha_0\mathbf{1}_{a_0} & & (0) \\ & 6\alpha_1\mathbf{1}_{a_1} & \\ (0) & & 6\alpha_2\mathbf{1}_{a_2-1} \end{bmatrix} + 6\alpha_2 \begin{bmatrix} 1 & \dots & 1 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & \dots & 1 \end{bmatrix} \right) \quad (3.1.38)$$

Donc en appliquant le théorème 3.1.9 on a qu'il existe un γ_x tel que pour tout $\gamma \leq \gamma_x$ la signature de \tilde{H} est la même que celle de H (avec toutes les valeurs propres non nulles). Donc quitte à changer la valeur de $\tilde{\gamma}$ en prenant le minimum de $\tilde{\gamma}$ et de tout les γ_x (vu que l'on a un nombre fini de point critique) on a bien que la matrice hessienne de \tilde{V}_0 en x a la même signature que la matrice hessienne de \tilde{V}_0 en x_0 pour tout $\gamma \leq \tilde{\gamma}$.

Et pour terminer, il nous reste à démontrer que la matrice hessienne de \tilde{V}_γ en x a la même signature que la matrice hessienne de \tilde{V}_0 en x pour γ suffisamment petit. Notons \tilde{H} et H la matrice hessienne de respectivement \tilde{V}_γ en x et \tilde{V}_0 en x . On a que

$$\tilde{V}_\gamma = \tilde{V}_0 + \frac{\gamma}{4}f \quad (3.1.39)$$

où f est définie par

$$f(\tilde{x}) = \frac{\gamma}{4} \left(\left(x_1 + \sum_{i=1}^{N-1} x_i \right)^2 + \left(x_{N-1} + \sum_{i=1}^{N-1} x_i \right)^2 + \sum_{i=1}^{N-2} (x_{i+1} - x_i)^2 \right). \quad (3.1.40)$$

En calculant les dérivées partielles secondes de f on obtient que sa matrice hessienne est $\frac{\gamma}{2}F$ où

$$F = \begin{bmatrix} 5 & 3 & \cdots & 3 & 4 \\ 3 & & & & 3 \\ \vdots & & (2) & & \vdots \\ 3 & & & & 3 \\ 5 & 3 & \cdots & 3 & 4 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 & -1 & & & (0) \\ -1 & 2 & \ddots & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & 2 & -1 \\ (0) & & & -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.1.41)$$

Donc on a la relation

$$\tilde{H} = H + \frac{\gamma}{2}F, \quad (3.1.42)$$

Donc en appliquant le théorème 3.1.9 on a qu'il existe un γ_x tel que pour tout $\gamma \leq \gamma_x$ la signature de \tilde{H} est la même que celle de H (avec toutes les valeurs propres non nulles). Donc quitte à changer la valeur de $\tilde{\gamma}$ en prenant le minimum de $\tilde{\gamma}$ et de tout les γ_x (vu que l'on a un nombre fini de point critique) on a bien que la matrice hessienne de \tilde{V}_γ en x a la même signature que la matrice hessienne de \tilde{V}_0 en x pour tout $\gamma \leq \tilde{\gamma}$.

Nous pouvons résumer tout ceci par le théorème qui suit

Théorème 3.1.10. *Pour N qui n'est pas un multiple de 3, l'ensemble des points critiques de $V_\gamma|_S$ est fini, et pour tout x point critique de $V_\gamma|_S$ il existe un x_0 point critique de $V_0|_S$ tel que*

$$x = x_0 + \mathcal{O}(\gamma). \quad (3.1.43)$$

De plus l'indice de selle du point critique x est le même que l'indice de selle du point critique x_0 et ne sont pas dégénérés (toutes les valeurs propres des hessiennes sont non nulles).

3.2 Recherche des liaisons

3.2.1 Étude des chemins

Dans les cas $N = 2$ et $N = 4$ on a trouvé les chemins à la main à l'aide d'un chemin linéaire. Comme nous connaissons explicitement les points critiques ainsi que leur indice de selle pour γ suffisamment petit dans le cas N quelconque, il nous faut étudier les chemins et nous allons voir que des chemins linéaires suffiront pour conclure.

Proposition 3.2.1. *Pour $N \geq 8$ quelconque et $\gamma = 0$, les chemins entre les selles d'indice 0 et 1 sont de la forme*

$$\begin{aligned} \left(0, \left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor, N - \left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor\right) &\leftrightarrow \left(1, \left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor - 1, N - \left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor\right) \leftrightarrow \left(0, \left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor - 1, N - \left\lfloor \frac{N}{2} \right\rfloor + 1\right) \leftrightarrow \dots \\ &\dots \leftrightarrow \left(1, \left\lfloor \frac{N}{3} \right\rfloor + 1, N - \left\lfloor \frac{N}{3} \right\rfloor - 2\right) \leftrightarrow \left(0, \left\lfloor \frac{N}{3} \right\rfloor + 1, N - \left\lfloor \frac{N}{3} \right\rfloor - 1\right), \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

avec pour règle : soit $a \in \left[\left\lfloor \frac{N}{3} \right\rfloor + 2, \left\lfloor \frac{N}{3} \right\rfloor\right]$, considérons α_1, α_2 et $\alpha'_0, \alpha'_1, \alpha'_2$ et α''_1, α''_2 les valeurs des coordonnées respectives des triplets critiques $(0, a, N - a)$ et $(1, a - 1, N - a)$ et $(0, a - 1, N - a + 1)$, alors on a

$$\begin{aligned} \alpha_1 &\leftrightarrow \alpha'_0 \leftrightarrow \alpha''_2 && (1 \text{ élément}) \\ \alpha_1 &\leftrightarrow \alpha'_1 \leftrightarrow \alpha''_1 && (a - 1 \text{ éléments}) \\ \alpha_2 &\leftrightarrow \alpha'_2 \leftrightarrow \alpha''_2 && (N - a \text{ éléments}) \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

Remarque 3.2.2. On a la même règle en prenant à l'opposé de toutes les valeurs des coordonnées.

Démonstration. Soit $a \in \llbracket \lfloor \frac{N}{3} \rfloor + 2, \lfloor \frac{N}{2} \rfloor \rrbracket$, montrons le cas $(0, a, N - a) \leftrightarrow (1, a - 1, N - a)$, l'autre type de chemin étant la même démonstration.

Pour le triplet critique $(0, a, N - a)$ on a :

$$\alpha_1 = (N - a)\omega, \quad \alpha_2 = -a\omega, \quad \omega = \sqrt{\frac{N}{a^3 + (N - a)^3}} = (N^2 - 3aN + 3a^2)^{-\frac{1}{2}}.$$

Pour le triplet critique $(1, a - 1, N - a)$ on a :

$$\alpha'_0 = -(N - 2a + 1)\omega', \quad \alpha'_1 = (N - a - 1)\omega', \quad \alpha'_2 = -(a - 2)\omega',$$

$$\omega' = \sqrt{\frac{N - 3}{(a - 2)^3 + (N - a - 1)^3}} = (N^2 - 3aN - 3a + 3 + 3a^2)^{-\frac{1}{2}}.$$

Prenons un chemin linéaire Γ entre $(\alpha_1, \alpha_1, \dots, \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_2)$ et $(\alpha'_0, \alpha'_1, \dots, \alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_2)$. Alors :

$$\begin{aligned} V_0 \circ \Gamma(t) &= \frac{1}{4}((1 - t)\alpha_1 + t\alpha'_0)^4 - \frac{1}{2}((1 - t)\alpha_1 + t\alpha'_0)^2 \\ &\quad + (a - 1) \left[\frac{1}{4}((1 - t)\alpha_1 + t\alpha'_1)^4 - \frac{1}{2}((1 - t)\alpha_1 + t\alpha'_1)^2 \right] \\ &\quad + (N - a) \left[\frac{1}{4}((1 - t)\alpha_2 + t\alpha'_2)^4 - \frac{1}{2}((1 - t)\alpha_2 + t\alpha'_2)^2 \right] \end{aligned}$$

Il nous faut montrer que cette fonction est croissante. En dérivant cette fonction on obtient :

$$\begin{aligned} (V_0 \circ \Gamma)'(t) &= (\alpha'_0 - \alpha_1) \left[((1 - t)\alpha_1 + t\alpha'_0)^3 - ((1 - t)\alpha_1 + t\alpha'_0) \right] \\ &\quad + (\alpha'_1 - \alpha_1)(a - 1) \left[((1 - t)\alpha_1 + t\alpha'_1)^3 - ((1 - t)\alpha_1 + t\alpha'_1) \right] \\ &\quad + (\alpha'_2 - \alpha_2)(N - a) \left[((1 - t)\alpha_2 + t\alpha'_2)^3 - ((1 - t)\alpha_2 + t\alpha'_2) \right] \end{aligned}$$

On sait que nous avons les relations suivantes

$$\begin{aligned} \alpha_1^3 - \alpha_1 &= \alpha_2^3 - \alpha_2 \\ a\alpha_1 + (N - a)\alpha_2 &= 0 \\ \alpha_0'^3 - \alpha_0' &= \alpha_1'^3 - \alpha_1' = \alpha_2'^3 - \alpha_2' \\ \alpha_0' + (a - 1)\alpha_1' + (N - a)\alpha_2' &= 0 \end{aligned} \tag{3.2.3}$$

Donc en utilisant ces relations on a

$$(V_0 \circ \Gamma)'(0) = (V_0 \circ \Gamma)'(1) = 0$$

Donc on peut écrire $(V_0 \circ \Gamma)'$ sous la forme

$$(V_0 \circ \Gamma)'(t) = Kt(t - 1)(t - \psi)$$

où

$$K = (\alpha'_0 - \alpha_1)^4 + (\alpha'_1 - \alpha_1)^4(a - 1) + (\alpha'_2 - \alpha_2)^4(N - a) > 0.$$

Si on a $\psi > 1$ alors la fonction $V_0 \circ \Gamma$ sera bien croissante. Remarquons que

$$\psi > 1 \Leftrightarrow (V_0 \circ \Gamma)''(1) < 0.$$

En dérivant $(V_0 \circ \Gamma)'$ et en l'évaluant en 1 puis en développant on a

$$\begin{aligned} (V_0 \circ \Gamma)''(1) &= 3\alpha_0'^4 - \alpha_0'^2 - 6\alpha_0'^3\alpha_1 + 2\alpha_0'\alpha_1 + 3\alpha_1^2\alpha_0'^2 - \alpha_1^2 \\ &\quad + (a - 1)[3\alpha_1'^4 - \alpha_1'^2 - 6\alpha_1'^3\alpha_1 + 2\alpha_1'\alpha_1 + 3\alpha_1^2\alpha_1'^2 - \alpha_1^2] \\ &\quad + (N - a)[3\alpha_2'^4 - \alpha_2'^2 - 6\alpha_2'^3\alpha_2 + 2\alpha_2'\alpha_2 + 3\alpha_2^2\alpha_2'^2 - \alpha_2^2] \end{aligned}$$

En utilisant les relations (3.2.3) pour remplacer les termes en α_i^4 et α_i^3 pour $i \in \{0, 1, 2\}$, puis en développant on a

$$\begin{aligned} (V_0 \circ \Gamma)''(1) &= 2\alpha_0'^2 - 4\alpha_0'\alpha_1 + 3\alpha_1^2\alpha_0'^2 - \alpha_1^2 \\ &\quad + (a-1)[2\alpha_1'^2 - 4\alpha_1'\alpha_1 + 3\alpha_1^2\alpha_1'^2 - \alpha_1^2] \\ &\quad + (N-a)[2\alpha_2'^2 - 4\alpha_2'\alpha_2 + 3\alpha_2^2\alpha_2'^2 - \alpha_2^2] \end{aligned}$$

De plus en utilisant encore les relations (3.2.3) on a

$$\alpha_0'\alpha_1 + (a-1)\alpha_1'\alpha_1 + (N-a)\alpha_2'\alpha_2 = (N-a)\alpha_2'(\alpha_2 - \alpha_1).$$

Donc :

$$\begin{aligned} (V_0 \circ \Gamma)''(1) &= 2[\alpha_0'^2 + (a-1)\alpha_1'^2 + (N-a)\alpha_2'^2] - 4(N-a)\alpha_2'(\alpha_2 - \alpha_1) - (a\alpha_1^2 + (N-a)\alpha_2^2) \\ &\quad + 3[\alpha_0^2\alpha_1^2 + (a-1)\alpha_1^2\alpha_1^2 + (N-a)\alpha_2^2\alpha_2^2] \end{aligned}$$

En remplaçant les α_i et α_i' pour $i \in \{0, 1, 2\}$ par leur valeur, puis en développant et factorisant on obtient

$$\begin{aligned} (V_0 \circ \Gamma)''(1) &= 2\omega'^2(-8Na + 8N + 9a^2 - 9a + aN^2 - Na^2) - 4(N-a)\omega\omega'(a-2)N - \omega^2(N-a)aN \\ &\quad + 3\omega^2\omega'^2(N-a)(3Na^2 - 9a^3 + 9a^2 + 9Na^2 - 3N^2a^2 - 4aN^2 - 9Na + N^3a + 4N^2) \end{aligned}$$

Nous voulons montrer que $(V_0 \circ \Gamma)''(1) < 0$. En remarquant que $4(N-a)\omega\omega'(a-2)N > 0$, en le passant de l'autre coté de l'inégalité, puis en divisant de chaque coté par $\omega^2\omega'^2$, puis en élevant au carré on a alors :

$$(V_0 \circ \Gamma)''(1) < 0 \Leftrightarrow f(a) < 0,$$

où la fonction f est définie par

$$\begin{aligned} f(a) &= \left[3(N-a)(3Na^2 - 9a^3 + 9a^2 + 9Na^2 - 3N^2a^2 - 4aN^2 - 9Na + N^3a + 4N^2) \right. \\ &\quad \left. + 2\omega^{-2}(-8Na + 8N + 9a^2 - 9a + aN^2 - Na^2) - \omega'^{-2}(N-a)aN \right]^2 \\ &\quad - 16(N-a)^2\omega^{-2}\omega'^{-2}(a-2)^2N^2 \end{aligned}$$

En remplaçant les valeurs de ω et ω' , puis en développant et factorisant la fonction f on obtient :

$$\begin{aligned} f(a) &= (2N-3a)^3(a-1) \left[(72N-243)a^4 + (-168N^2+468N+243)a^3 \right. \\ &\quad \left. + 3N(48N^2-101N-156)a^2 + N^2(-56N^2+74N+303)a + 2N^3(4N^2-37) \right] \end{aligned}$$

Comme $(2n-3a)^3 > 0$ et $a-1 > 0$ on a $f(a) < 0 \Leftrightarrow g(a) < 0$ avec la fonction g définie par

$$\begin{aligned} g(a) &= (72N-243)a^4 + (-168N^2+468N+243)a^3 \\ &\quad + 3N(48N^2-101N-156)a^2 + N^2(-56N^2+74N+303)a + 2N^3(4N^2-37) \end{aligned}$$

Comme $N \geq 4$ en dérivant 4 fois la fonction g on a

$$g^{(4)}(a) > 0,$$

donc $g^{(3)}$ est une fonction croissante. En l'évaluant en $\frac{N}{2}$ on a

$$g^{(3)}\left(\frac{N}{2}\right) = -144N^2 - 108N + 1458,$$

et les racines de ce polynôme en N sont $-\frac{3}{8}(1 + \sqrt{73})$ et $-\frac{3}{8}(1 - \sqrt{73})$. Comme $N \geq 4$ on a alors

$$g^{(3)}(a) < 0,$$

donc g'' est une fonction décroissante. En l'évaluant en $\frac{N}{2}$ on a

$$g''\left(\frac{N}{2}\right) = 69N(N-3),$$

comme $N \geq 4$ on a donc que g' est une fonction croissante. En l'évaluant en $\frac{N}{2}$ on a

$$g'\left(\frac{N}{2}\right) = -\frac{1}{4}N^2(8N^2 - 2N - 69),$$

dont les racines de ce polynôme sont 0 , $\frac{1}{8}(1 + \sqrt{553})$ et $\frac{1}{8}(1 - \sqrt{553})$. Comme $N \geq 4$ on a alors $g'(a) < 0$ donc g est une fonction décroissante. Remarquons que $[[\frac{n}{3}] + 2, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor] \subset [\frac{n}{3} + \frac{4}{3}, \frac{n}{2}]$, donc pour montrer que $g(a) < 0$ pour tout $a \in [[\frac{n}{3}] + 2, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor]$, comme nous savons que c'est une fonction décroissante il suffit de montrer que

$$\forall N \geq 4, g\left(\frac{N}{3} + \frac{4}{3}\right) < 0.$$

Alors définissons la fonction h par

$$h(N) = g\left(\frac{N}{3} + \frac{4}{3}\right) = -\frac{16}{9}N^4 + 16N^3 - \frac{208}{3}N^2 + \frac{1520}{9}N - 192.$$

En dérivant la fonction h , puis en calculant les racines du polynôme de degré 3 en N on obtient que h' admet deux racines complexes et une racine réelle et en évaluant h en cette racine on a

$$h\left(\frac{1}{4}(85 + 8\sqrt{303})^{\frac{1}{3}} - \frac{23}{4}(85 + 8\sqrt{303})^{-\frac{1}{3}} + \frac{9}{4}\right) < 0$$

Donc $g(a) < 0$ pour tout $a \in [[\frac{n}{3}] + 2, \lfloor \frac{n}{2} \rfloor]$, ce qui conclut la démonstration. \square

Dans l'étude des points critiques, nous avons commencé avec $\gamma = 0$ puis nous avons montré que cela restait vrai pour γ suffisamment petit. Nous avons donc l'équivalent pour les chemins.

Proposition 3.2.3. *En prenant les mêmes notations que la proposition 3.2.1, la Proposition 3.2.1 reste vraie pour γ suffisamment petit.*

Démonstration. Pour le prouver il suffit de voir que ψ , de la démonstration précédente, dépend continument de γ donc on peut trouver un $\tilde{\gamma}$ tel que pour tout $\gamma \leq \tilde{\gamma}$ on ait $\psi \geq 1$ ce qui nous permet d'avoir que le chemin linéaire est toujours croissant. \square

Avec cette proposition nous avons une liste de chemins mais il faut maintenant vérifier qu'il n'y en pas d'autre.

Proposition 3.2.4. *Tous les chemins ont été énumérés avec les deux règles précédentes.*

Démonstration. On sait que de manière générale une selle d'indice 1 permet de faire la liaison entre deux selles d'indice 0. Donc si le nombre de chemins trouvés pour a fixé est égal au nombre de selles d'indice 1 alors nous avons bien le résultat car il n'y a pas d'autres selles d'indice 0 et 1 grâce à la proposition 3.1.6.

Soit $a \in [[\frac{N}{3}] + 2, \lfloor \frac{N}{2} \rfloor]$, considérons α_1, α_2 et $\alpha'_0, \alpha'_1, \alpha'_2$ et α''_1, α''_2 les valeurs des coordonnées respectives des triplets critiques $(0, a, N-a)$ et $(1, a-1, N-a)$ et $(0, a-1, N-a+1)$.

Le nombre de selle d'indices 1 est $2\binom{N}{N-a}\binom{a}{a-1}$.

Pour le nombre de chemins trouvés, il y a $\binom{N}{N-a}$ éléments de triplet critique $(0, a, N-a)$, on a deux règles possible (celle énoncée et celle en passant à l'opposé) et on a a choix possible dans ces règles. Soit un total de $2\binom{N}{N-a}\binom{a}{a-1}$ chemins. \square

Grâce à la proposition 3.2.1 nous avons la structure pour N quelconque. En notant B_1 l'ensemble des éléments de triplet critique $(0, \lfloor \frac{N}{2} \rfloor, N - \lfloor \frac{N}{2} \rfloor)$, C_1 l'ensemble des éléments de triplet critique $(1, \lfloor \frac{N}{2} \rfloor - 1, N - \lfloor \frac{N}{2} \rfloor)$, B_2 l'ensemble des éléments de triplet critique $(0, \lfloor \frac{N}{2} \rfloor - 1, N - \lfloor \frac{N}{2} \rfloor + 1)$, et ainsi de suite, alors la structure des chemins est de la forme :

$$B_1 \leftrightarrow C_1 \leftrightarrow B_2 \leftrightarrow \dots \leftrightarrow C_k \leftrightarrow B_{k+1} \quad (3.2.4)$$

3.2.2 Début de hiérarchie à l'ordre dominant

Nous verrons dans le chapitre 4 que nous définirons ce que l'on appellera hiérarchie métastable, pour le moment nous allons donner une hiérarchie des B_i (voir (3.2.4)) suivant ce que l'on va appeler hauteur de communication, à l'ordre dominant en γ , c'est à dire

Définition 3.2.5. *La hauteur de communication de B_i vers B_{i+1} correspond à la différence de la hauteur potentiel de C_i et de la hauteur du potentiel B_i .*

Remarque 3.2.6. Cette définition est bien posée car la hauteur de potentiel de chaque élément de B_i est la même et pareil pour chaque élément de C_i à l'ordre dominant en γ .

Tout d'abord nous allons voir que la hauteur de communication de B_i vers B_{i+1} est croissante en i .

Proposition 3.2.7. *La hauteur de potentiel entre les triplets critiques $(0, a, N-a)$ et $(1, a-1, N-a)$, pour $a \in [\lfloor \frac{N}{3} \rfloor + 2, \lfloor \frac{N}{2} \rfloor]$, est une fonction décroissante en a .*

Démonstration. Soit f , la fonction qui à a , associe la différence de hauteur de potentiel des triplets critiques $(0, a, N-a)$ et $(1, a-1, N-a)$, alors en mettant sous le même dénominateur et en factorisant, on a

$$f(a) = \frac{(a-1)(2N-3a)^3}{4(N^2-3Na+3a^2-3a+3)(N^2-3Na+3a^2)}.$$

En dérivant f puis en écrivant le numérateur sous forme de polynôme en a , on obtient :

$$f'(a) = \frac{1}{4}(N^2-3Na+3a^2-3a+3)^{-2}(N^2-3Na+3a^2)^{-2} [(-18N^2+54N-54)a^3 + (24N^3-54N^2+36N+27)a^2 + 6N(-2N^3+4N^2-3N-3)a + N^2(2N^3-3N^2+9)]$$

Donc $f'(a) < 0 \Leftrightarrow g(a) < 0$ où la fonction g est définie par

$$g(a) = (-18N^2+54N-54)a^3 + (24N^3-54N^2+36N+27)a^2 + N(-12N^3+24N^2-18N-18)a + N^2(2N^3-3N^2+9)$$

En dérivant 3 fois la fonction g on voit que

$$g^{(3)}(a) < 0,$$

car le polynôme de degré 2 en N obtenu n'admet que des racines complexes, donc la fonction g'' est décroissante. La fonction g'' admet une racine qui est

$$a = \frac{1}{18} \frac{8n^3 - 18n^2 + 12n + 9}{n^2 - 3n + 3}.$$

Or nous pouvons voir que

- en évaluant g'' en $\frac{N+2}{3}$ on obtient

$$g''\left(\frac{N+2}{3}\right) = 2N^3 - 12N^2 + 30N - 27,$$

dont ce polynôme en N admet deux racines complexes et une réelle qui est

$$-\frac{1}{2}(2+2\sqrt{17})^{\frac{1}{3}} + 2(2+2\sqrt{17})^{-\frac{1}{3}} + 2 \simeq 1.834835200,$$

et comme $N \geq 8$ alors

$$g''\left(\frac{N+2}{3}\right) > 0;$$

- en évaluant g'' en $\frac{N}{2}$ on obtient

$$g''\left(\frac{N}{2}\right) = 2N^3 - 12N^2 + 30N - 27,$$

dont ce polynôme en N admet deux racines complexes et une réelle qui est

$$(9 + \sqrt{17})^{\frac{1}{3}} + 9(9 + \sqrt{17})^{-\frac{1}{3}} + 3 \simeq 7.054558822,$$

et comme $N \geq 8$ alors

$$g''\left(\frac{N}{2}\right) < 0.$$

Donc la racine de g'' est dans l'intervalle $[\frac{n+2}{3}, \frac{n}{2}]$, alors la fonction g' est croissante puis décroissante. En évaluant g' en la racine de g'' puis en factorisant on obtient

$$g'\left(\frac{1}{18} \frac{8N^3 - 18N^2 + 12N + 9}{N^2 - 3N + 3}\right) = -\frac{1}{6} \frac{(2N^2 - 6N + 3)(4N^4 - 24N^3 + 42N^2 - 18N - 27)}{N^2 - 3N + 3},$$

dont les racines sont toutes inférieures à 4 donc

$$g'\left(\frac{1}{18} \frac{8n^3 - 18n^2 + 12n + 9}{n^2 - 3n + 3}\right) < 0,$$

d'où $g'(a) < 0$ pour $a \in [\frac{N+2}{3}, \frac{N}{2}]$ alors g est une fonction décroissante. En évaluant g en $\frac{N+2}{3}$ puis en factorisant, on a

$$g\left(\frac{N+2}{3}\right) = -\frac{1}{3}(N^2 - (4 + \sqrt{6})N + 6 + 2\sqrt{6})(N^2 - (4 - \sqrt{6})N + 6 - 2\sqrt{6}),$$

dont les racines sont toutes complexes d'où $g\left(\frac{N+2}{3}\right) < 0$. Donc $g(a) < 0$ sur $[\frac{N+2}{3}, \frac{N}{2}]$.

Alors f est décroissante sur $[\frac{N+2}{3}, \frac{N}{2}]$ d'où le résultat. \square

Maintenant nous allons voir que la hauteur de communication de B_{i+1} vers B_i est décroissante en i .

Proposition 3.2.8. *La hauteur de potentiel entre les triplets critiques $(1, a, N - a - 1)$ et $(0, a, N - a)$, pour $a \in [[\frac{N}{3}] + 1, [\frac{N}{2}] - 1]$, est une fonction croissante en a .*

Démonstration. Soit f la fonction qui à a associe la différence de hauteur de potentiel des triplets critiques $(1, a, N - a - 1)$ et $(0, a, N - a)$, alors en mettant sous le même dénominateur et en factorisant, on a

$$f(a) = \frac{(N - a - 1)(3a - N)^3}{4(N^2 - 3N - 3Na + 3a + 3 + 3a^2)(N^2 - 3Na + 3a^2)}.$$

En la dérivant f puis en écrivant le numérateur sous forme de polynôme en a , on obtient

$$f'(a) = -\frac{1}{4}(N^2 - 3N - 3Na + 3a + 3 + 3a^2)^{-2}(N^2 - 3Na + 3a^2)^{-2}[(18N^2 - 54N + 54)a^3 + (-30N^3 + 108N^2 - 126N + 27)a^2 + 6N(3N^3 - 13N^2 + 18N - 6)a - N^2(4N^3 - 21N^2 + 36N - 18)]$$

Donc $f'(a) > 0 \Leftrightarrow g(a) < 0$ où la fonction g est définie par

$$g(a) = (18N^2 - 54N + 54)a^3 + (-30N^3 + 108N^2 - 126N + 27)a^2 + 6N(3N^3 - 13N^2 + 18N - 6)a - N^2(4N^3 - 21N^2 + 36N - 18)$$

En dérivant 3 fois la fonction g , puis en remarquant que le polynôme en N n'admet que des racines complexes, on a alors que $g^{(3)}(a) > 0$ donc g'' est une fonction croissante. En évaluant g'' en $\frac{N}{2}$ on a

$$g''\left(\frac{N}{2}\right) = -6N^3 + 54N^2 - 90N + 54,$$

dont ce polynôme en N admet deux racines complexes et une racine réelle qui est

$$(9 + \sqrt{17})^{\frac{1}{3}} + 4(9 + \sqrt{17})^{-\frac{1}{3}} + 3 \simeq 7.054558822,$$

et comme $N \geq 8$ alors $g''(a) < 0$ pour $a \in [\frac{N}{3}, \frac{N}{2}]$, donc g' est décroissante. En évaluant g' en $\frac{N}{2}$ puis en factorisant, on a

$$g' \left(\frac{N}{2} \right) = \frac{3}{2}N(N^3 - 7N^2 + 15N - 6),$$

dont ce polynôme en N admet deux racines complexes et deux racines réelles qui sont 0 et

$$-\frac{1}{6}(388 + 36\sqrt{113})^{\frac{1}{3}} - \frac{8}{3}(388 + 36\sqrt{113})^{-\frac{1}{3}} + \frac{7}{3} \simeq 0.514416002,$$

et comme $N \geq 8$ alors $g'(a) > 0$ pour $a \in [\frac{N}{3}, \frac{N}{2}]$, donc g est croissante. En évaluant g en $\frac{N}{2}$ on obtient

$$g \left(\frac{N}{2} \right) = -\frac{1}{4}N^2(N-3)^3 < 0,$$

donc $g(a) < 0$ pour $a \in [\frac{N}{3}, \frac{N}{2}]$, d'où le résultat. □

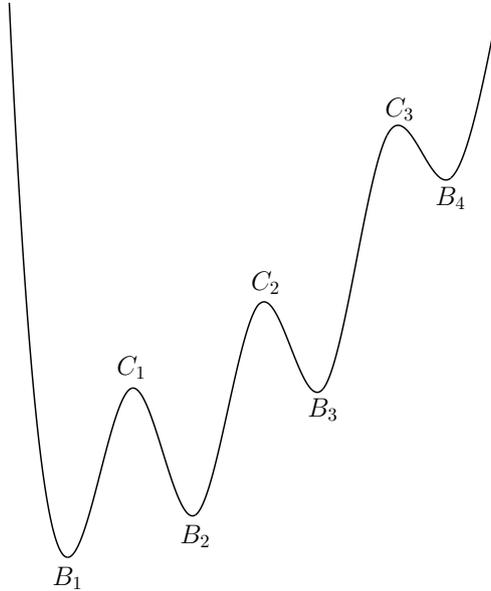
On peut alors donner un début de hiérarchie pour le système :

Théorème 3.2.9. *La hiérarchie est B_1 puis B_2 et ainsi de suite jusqu'à B_{k+1} .*

Remarque 3.2.10. Cela veut dire que si on écrit de façon croissante les hauteurs de communication, alors la plus basse est B_{k+1} vers B_k , puis B_k vers B_{k-1} et ainsi de suite jusqu'à B_2 vers B_1 .

Démonstration. Grâce aux deux propositions précédentes et en remarquant qu'elles sont égales en $\frac{N}{2}$ on en déduit le résultat. □

Nous pouvons résumer cela par le dessin suivant, où $N = 20$ alors $k = 3$:



Cette hiérarchie étant assez faible nous allons, dans la sous-section suivante, en donner une plus poussée pour B_1 dans le cas où N est pair (et toujours bien sur, non multiple de 3).

3.2.3 Hiérarchie plus fine sur B_1 .

D'après ce nous avons fait jusqu'à maintenant, nous savons que chaque coordonnée d'un élément de B_1 est de la forme

$$x_i = \pm 1 + \mathcal{O}(\gamma), \quad (3.2.5)$$

car nous considérons uniquement le cas où N est pair. Par la suite, nous ferons un abus de notation, pour les éléments de B_1 , en écrivant

$$\alpha_1 = -\alpha_2 = 1. \quad (3.2.6)$$

Dans le prochain paragraphe nous allons introduire un nouvel objet, les interfaces, car nous verrons, dans un deuxième paragraphe, que le coefficient à l'ordre 1 en γ de la hauteur du potentiel des éléments de B_i et C_i dépend uniquement des interfaces.

Définitions et propositions

Définition 3.2.11. Soit $x = (x_1, \dots, x_N)$ un point critique, donc on sait que

$$\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket, x_i \in \{\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2\}. \quad (3.2.7)$$

On définit le nombre d'interfaces de type α_0/α_1 (il en va de même pour α_0/α_1 et α_1/α_2) d'une coordonnée x_i de x par

$$I_{\alpha_0/\alpha_1}^x(i) = \mathbf{1}_{(x_{i-1}, x_i) \in \{(\alpha_0, \alpha_1), (\alpha_1, \alpha_0)\}} + \mathbf{1}_{(x_i, x_{i+1}) \in \{(\alpha_0, \alpha_1), (\alpha_1, \alpha_0)\}}, \quad (3.2.8)$$

ainsi que le nombre d'interfaces de type α_0/α_1 pour x par

$$I_{\alpha_0/\alpha_1}(x) = \sum_{i=1}^N \mathbf{1}_{(x_i, x_{i+1}) \in \{(\alpha_0, \alpha_1), (\alpha_1, \alpha_0)\}}. \quad (3.2.9)$$

Remarque 3.2.12. On a toujours $I_{\alpha_0/\alpha_1}^x(i) \in \{0, 1, 2\}$.

Proposition 3.2.13. Soit $x = (x_1, \dots, x_N)$ un point critique d'un des B_i , donc on sait que

$$\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket, x_i \in \{\alpha_1, \alpha_2\}. \quad (3.2.10)$$

Alors la permutation de deux coordonnées ne peut changer le nombre d'interfaces que de façon pair.

Démonstration. Soient $i, j \in \llbracket 1, N \rrbracket$. Si $x_i = x_j$ alors on ne change pas le nombre d'interfaces, supposons donc que $x_i \neq x_j$. Posons x' le N -uplet x donc les coordonnées i et j sont permutées et $\gamma = (I_{\alpha_1/\alpha_2}^x(i), I_{\alpha_1/\alpha_2}^x(j))$. En étudiant tous les cas possibles, suivant les valeurs possibles de γ , et de si i et j sont voisins (c'est à dire $i = j + 1$ ou $i = j - 1$) nous avons les tableaux suivants :

i et j non voisin		i et j voisin	
γ	$I_{\alpha_1/\alpha_2}(x')$	γ	$I_{\alpha_1/\alpha_2}(x')$
(0, 0)	$I_{\alpha_1/\alpha_2}(x) + 4$	(1, 1)	$I_{\alpha_1/\alpha_2}(x) + 2$
(1, 0) ou (0, 1)	$I_{\alpha_1/\alpha_2}(x) + 2$	(1, 2) ou (2, 1)	$I_{\alpha_1/\alpha_2}(x)$
(1, 1)	$I_{\alpha_1/\alpha_2}(x)$	(2, 2)	$I_{\alpha_1/\alpha_2}(x) - 2$
(2, 0) ou (0, 2)	$I_{\alpha_1/\alpha_2}(x)$		
(2, 1) ou (1, 2)	$I_{\alpha_1/\alpha_2}(x) - 2$		
(2, 2)	$I_{\alpha_1/\alpha_2}(x) - 4$		

D'où le résultat. □

Corollaire 3.2.14. Soit $x \in B_1$ alors $I_{1/-1}(x)$ est pair.

Démonstration. Soit $x \in B_1$. Remarquons que l'élément $\tilde{x} \in B_1$ défini par

$$\forall i \in \left[1, \frac{N}{2}\right] \tilde{x}_i = 1 \text{ et } \forall i \in \left[\frac{N}{2}, N\right] \tilde{x}_i = -1$$

vérifie $I_{1/-1}(\tilde{x}) = 2$. Donc, en permutant successivement les coordonnées de \tilde{x} pour obtenir x , grâce à la proposition 3.2.13, on sait que l'interface reste toujours pair après chaque permutation, donc $I_{1/-1}(x)$ est bien pair. \square

Remarque 3.2.15. Soit $x \in C_1$ alors $I_{\alpha'_0/\alpha'_1}(x) + I_{\alpha'_0/\alpha'_2}(x) = 2$ car une seule des coordonnées de x vaut α'_0 .

Corollaire 3.2.16. Soit $x \in C_1$, si :

- $(I_{\alpha'_0/\alpha'_1}(x), I_{\alpha'_0/\alpha'_2}(x)) \in \{(2, 0), (0, 2)\}$ alors $I_{\alpha'_1/\alpha'_2}(x)$ est pair,
- $(I_{\alpha'_0/\alpha'_1}(x), I_{\alpha'_0/\alpha'_2}(x)) = (1, 1)$ alors $I_{\alpha'_1/\alpha'_2}(x)$ est impair.

Proposition 3.2.17. On a les égalités suivantes :

$$I_{1/-1}(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N I_{1/-1}^x(i) = \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=1} I_{1/-1}^x(i) = \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=-1} I_{1/-1}^x(i). \quad (3.2.11)$$

Démonstration. Pour la première égalité, en remplaçant $I_{1/-1}(x)$ par sa valeur et en l'écrivant comme la moitié de deux fois sa somme, on a

$$I_{1/-1}(x) = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{(x_i, x_{i+1}) \in \{(\pm 1, \mp 1)\}} + \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{(x_i, x_{i+1}) \in \{(\pm 1, \mp 1)\}} \right).$$

Puis en changeant l'indice de sommation de la deuxième somme, on a

$$\begin{aligned} I_{1/-1}(x) &= \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{(x_i, x_{i+1}) \in \{(\pm 1, \mp 1)\}} + \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{(x_{i-1}, x_i) \in \{(\pm 1, \mp 1)\}} \right) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N I_{1/-1}^x(i), \end{aligned}$$

d'où la première égalité.

Pour la troisième égalité, en remplaçant $I_{1/-1}^x(i)$ par sa valeur, et comme on multiplie par $\mathbb{1}_{x_i=1}$ alors on a

$$\sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=1} I_{1/-1}^x(i) = \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=1} (\mathbb{1}_{x_{i+1}=-1} + \mathbb{1}_{x_{i-1}=-1}).$$

En scindant la somme en deux puis en changeant l'indice de sommation des deux sommes puis en factorisant par $\mathbb{1}_{x_i=-1}$ on a

$$\sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=1} I_{1/-1}^x(i) = \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=-1} (\mathbb{1}_{x_{i+1}=1} + \mathbb{1}_{x_{i-1}=1}).$$

Et comme on multiplie par $\mathbb{1}_{x_i=-1}$, en faisant la même opération que nous avons fait au début (mais dans le sens inverse) on a

$$\sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=1} I_{1/-1}^x(i) = \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=-1} I_{1/-1}^x(i),$$

d'où la troisième égalité.

Pour la deuxième égalité, comme pour tout $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ on a

$$(\mathbb{1}_{x_i=1} + \mathbb{1}_{x_i=-1}) = 1,$$

en remplaçant $I_{1/-1}^x(i)$ par $(\mathbb{1}_{x_i=1} + \mathbb{1}_{x_i=-1})I_{1/-1}^x(i)$, puis en développant et en scindant la somme en deux, on a

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N I_{1/-1}^x(i) = \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=1} I_{1/-1}^x(i) + \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=-1} I_{1/-1}^x(i) \right).$$

Comme nous avons montré la troisième égalité, les deux sommes sont égales, donc

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N I_{1/-1}^x(i) = \frac{1}{2} \left(2 \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=1} I_{1/-1}^x(i) \right) = \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=1} I_{1/-1}^x(i),$$

d'où la troisième égalité. \square

Proposition 3.2.18. *Soit $x \in B_1$. Si $I_{1/-1}(x) > \frac{N}{2}$ alors on a*

$$\exists i \in \llbracket 1, N \rrbracket, I_{1/-1}^x(i) = 2. \quad (3.2.12)$$

Démonstration. Soit $x \in B_1$ tel que $I_{1/-1}(x) > \frac{N}{2}$. Supposons par l'absurde que

$$\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket, I_{1/-1}^x(i) \in \{0, 1\}.$$

Or, d'après la proposition précédente, on a

$$I_{1/-1}(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N I_{1/-1}^x(i) \leq \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N 1 = \frac{N}{2}$$

Ce qui est absurde, d'où le résultat. \square

Corollaire 3.2.19. *Soit $x \in B_1$. Si $I_{1/-1}(x) > \frac{N}{2}$ alors il existe $i, j \in \llbracket 1, N \rrbracket$ non voisins tels que*

$$I_{1/-1}^x(i) = 2 \text{ et } I_{1/-1}^x(j) \in \{1, 2\} \text{ et } x_i \neq x_j. \quad (3.2.13)$$

Démonstration. Soit $x \in B_1$ tel que $I_{1/-1}(x) > \frac{N}{2}$. Par la proposition précédente il existe $k \in \llbracket 1, N \rrbracket$ tel que $I_{1/-1}^x(k) = 2$. Comme $N \geq 8$ alors $I_{1/-1}(x) > 4$ d'où $I_{1/-1}(x) \geq 5$. Supposons sans perte de généralité que $x_k = 1$. En utilisant les formules (3.2.11) on a

$$\begin{aligned} I_{1/-1}(x) &= \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=-1} I_{1/-1}^x(i) \\ &= \sum_{i=1, i \neq k-1, k, k+1}^N \mathbb{1}_{x_i \neq x_k} I_{1/-1}^x(i) + I_{1/-1}^x(k-1) + I_{1/-1}^x(k+1). \end{aligned}$$

Et comme pour tout $i \in \llbracket 1, \rrbracket$ on a $I_{1/-1}^x(i) \in \llbracket 0, 2 \rrbracket$, alors

$$\sum_{i=1, i \neq k-1, k, k+1}^N \mathbb{1}_{x_i \neq x_k} I_{1/-1}^x(i) \geq 5 - I_{1/-1}^x(k-1) - I_{1/-1}^x(k+1) \geq 5 - 2 - 2 = 1$$

Donc il existe j non voisin de k tel que $x_j \neq x_k$ et $I_{1/-1}^x(j) \in \{1, 2\}$, d'où le résultat. \square

Proposition 3.2.20. *Soit $x \in B_1$ tel que $4 \leq I_{1/-1}(x) \leq \frac{N}{2}$. Si il existe $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ tel que $I_{1/-1}^x(i) = 2$ alors il existe $j \in \llbracket 1, N \rrbracket$ non voisin de i tel que*

$$x_i \neq x_j \text{ et } I_{1/-1}^x(j) \in \{1, 2\}. \quad (3.2.14)$$

Démonstration. Par hypothèse il existe $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ tel que $I_{1/-1}^x(i) = 2$. Donc $x_{i-1} = x_{i+1} \neq x_i$.

Comme on a $\frac{N}{2}$ coordonnées égales à x_{i-1} donc il existe $j \in \llbracket 1, N \rrbracket$ tel que $x_j = x_{i-1}$.

Si $I_{1/-1}^x(j) \in \{1, 2\}$ la proposition est prouvée.

Si $I_{1/-1}^x(j) = 0$ alors on regarde les voisins de j jusqu'à obtenir :

$$x_k = x_{k+1} = \dots = x_{j-1} = x_j = x_{j+1} = \dots = x_{k'-1} = x_{k'} \text{ et } I_{1/-1}^x(k) = I_{1/-1}^x(k') = 1.$$

Si $k = i + 1$ et $k' = i - 1$ alors on aurait toutes les coordonnées égales à la valeur de x_j sauf x_i , or c'est impossible car on a autant de coordonnées égales à -1 et 1 . Donc $k \neq i + 1$ ou $k' \neq i - 1$.

Alors le couple (i, k) (respectivement (i, k')) convient si $k \neq i + 1$ (respectivement $k' \neq i - 1$). \square

Proposition 3.2.21. *Soit $x \in B_1$ tel que $4 \leq I_{1/-1}(x) \leq \frac{N}{2}$. Si on a*

$$\forall i \in \llbracket 1, n \rrbracket, I_{1/-1}^x(i) \in \{0, 1\}, \quad (3.2.15)$$

alors il existe $i, j \in \llbracket 1, N \rrbracket$ non voisins tels que

$$x_i \neq x_j \text{ et } I_{1/-1}^x(i) = I_{1/-1}^x(j) = 1. \quad (3.2.16)$$

Démonstration. Comme

$$I_{1/-1}(x) = \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{x_i=1} I_{1/-1}^x(i) \geq 4$$

alors il existe $k \in \llbracket 1, N \rrbracket$ tel que $x_k = 1$ et $I_{1/-1}^x(k) \in \{1, 2\}$. De plus avec l'hypothèse (3.2.15) on a $I_{1/-1}^x(k) = 1$.

Et comme

$$I_{1/-1}(x) = \sum_{i=1}^n \mathbb{1}_{x_i=-1} I_{1/-1}^x(i) \geq 4,$$

grâce à l'hypothèse (3.2.15) il existe au moins quatre éléments $j_1, j_2, j_3, j_4 \in \llbracket 1, N \rrbracket$ tels que

$$x_{j_1} = x_{j_2} = x_{j_3} = x_{j_4} = -1 \text{ et } I_{1/-1}^x(j_1) = I_{1/-1}^x(j_2) = I_{1/-1}^x(j_3) = I_{1/-1}^x(j_4) = 1.$$

Comme chaque coordonnée n'a que deux voisins, alors il existe bien $j \in \llbracket 1, N \rrbracket$ non voisin avec k tel que $x_j = -1$ et $I_{1/-1}^x(j) = 1$, d'où le résultat. \square

Classement des selles selon leurs hauteurs au premier ordre On s'intéresse aux selles, c'est à dire $x \in C_1$. Rappelons que l'on a :

$$\alpha'_0 = -\omega', \alpha'_1 = \left(\frac{N}{2} - 1\right) \omega', \alpha'_2 = -\left(\frac{N}{2} - 2\right) \omega', \omega' = \left(\frac{1}{4}N^2 - \frac{3}{2} + 3\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (3.2.17)$$

Dans la formule (3.1.19) on a des signes \pm et \mp , ici nous avons fait un choix de signes pour simplifier, nous verrons plus tard que cela impliquera de considérer deux cas.

Nous savons que si l'on prend deux points critiques x, x' , de même triplet critique (a, b, c) , ils ont la même hauteur de potentiel à l'ordre 0 en γ . Dans cette sous-section nous avons introduit les interfaces, et l'un des intérêts principaux de ces éléments est la caractérisation de la hauteur de potentiel à l'ordre 1 en γ .

Proposition 3.2.22. *Soit x un point critique de triplet critique (a, b, c) . Le coefficient d'ordre 1 en γ de la hauteur de potentiel de x est*

$$\frac{1}{4}(\alpha_0 - \alpha_1)^2 I_{\alpha_0/\alpha_1}(x) + \frac{1}{4}(\alpha_0 - \alpha_2)^2 I_{\alpha_0/\alpha_2}(x) + \frac{1}{4}(\alpha_1 - \alpha_2)^2 I_{\alpha_1/\alpha_2}(x) \quad (3.2.18)$$

Démonstration. Soit x un point critique de triplet critique (a, b, c) . Notons

$$\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket, x_i = \phi_i + \psi_i \gamma + \mathcal{O}(\gamma^2),$$

les développements à l'ordre 1 en γ de chaque coordonnée du point critique x . Remarquons que

$$\forall i \in \llbracket 1, N \rrbracket, \phi_i \in \{\alpha_0, \alpha_1, \alpha_2\}.$$

En remplaçant les x_i par leurs valeurs, le coefficient d'ordre 1 en γ de la hauteur de potentiel de x , que l'on notera Θ , est

$$\Theta = \sum_{i=1}^N (\phi_i^3 \psi_i - \phi_i \psi_i) + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N (\phi_{i+1} - \phi_i)^2$$

Comme on sait que

$$\alpha_0^3 - \alpha_0 = \alpha_1^3 - \alpha_1 = \alpha_2^3 - \alpha_2,$$

et en remarquant que pour tout $i \in \llbracket 1, N \rrbracket$ on a

$$\mathbb{1}_{(x_i, x_{i+1}) \in \{(\alpha_0, \alpha_1), (\alpha_1, \alpha_0)\}} + \mathbb{1}_{(x_i, x_{i+1}) \in \{(\alpha_0, \alpha_2), (\alpha_2, \alpha_0)\}} + \mathbb{1}_{(x_i, x_{i+1}) \in \{(\alpha_1, \alpha_2), (\alpha_2, \alpha_1)\}} = 1,$$

alors

$$\begin{aligned} \Theta &= (\alpha_0^3 - \alpha_0) \sum_{i=1}^N \psi_i + \frac{1}{4} (\alpha_0 - \alpha_1)^2 \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{(x_i, x_{i+1}) \in \{(\alpha_0, \alpha_1), (\alpha_1, \alpha_0)\}} \\ &\quad + \frac{1}{4} (\alpha_0 - \alpha_2)^2 \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{(x_i, x_{i+1}) \in \{(\alpha_0, \alpha_2), (\alpha_2, \alpha_0)\}} + \frac{1}{4} (\alpha_1 - \alpha_2)^2 \sum_{i=1}^N \mathbb{1}_{(x_i, x_{i+1}) \in \{(\alpha_1, \alpha_2), (\alpha_2, \alpha_1)\}}. \end{aligned}$$

En remarquant que

$$\sum_{i=1}^N \psi_i = 0,$$

car $x \in S$ et que les autres sommes sont en fait les interfaces, on obtient donc le résultat. \square

Définition 3.2.23. Soient $x, x' \in C_1$ et notons leurs interfaces

$$\begin{aligned} (a, b, c) &= (I_{\alpha'_0/\alpha'_1}(x), I_{\alpha'_0/\alpha'_2}(x), I_{\alpha'_1/\alpha'_2}(x)), \\ (a', b', c') &= (I_{\alpha'_0/\alpha'_1}(x'), I_{\alpha'_0/\alpha'_2}(x'), I_{\alpha'_1/\alpha'_2}(x')). \end{aligned} \tag{3.2.19}$$

Alors on dira $(a, b, c) \succeq (a', b', c')$ si et seulement si la hauteur de potentiel à l'ordre un de x est supérieure ou égale à celle de x' .

Proposition 3.2.24. Pour $N \geq 8$ on a :

1. $\forall p \in \llbracket 2, N-4 \rrbracket, (2, 0, p) \succeq (0, 2, p)$ (remarque p est pair),
2. $\forall p \in \llbracket 2, N-2 \rrbracket, (0, 2, p) \succeq (1, 1, p-1)$ (remarque p est pair),
3. $\forall p \in \llbracket 1, N-3 \rrbracket, (1, 1, p) \succeq (2, 0, p-1)$ (remarque p est impair).

Démonstration. Tout d'abord un simple calcul nous donne :

$$(\alpha'_0 - \alpha'_1)^2 = \left(\frac{N}{2}\right)^2 \omega'^2, \quad (\alpha'_0 - \alpha'_2)^2 = \left(\frac{N}{2} - 3\right)^2 \omega'^2, \quad (\alpha'_1 - \alpha'_2)^2 = (N-3)^2 \omega'^2$$

1. La différence de hauteur de potentiel est

$$\frac{1}{2}(\alpha'_0 - \alpha'_1)^2 - \frac{1}{2}(\alpha'_0 - \alpha'_2)^2 = (3N-3)\omega'^2 > 0,$$

d'où le premier point.

2. La différence de hauteur de potentiel est

$$-\frac{1}{4}(\alpha'_0 - \alpha'_1)^2 + \frac{1}{4}(\alpha'_0 - \alpha'_2)^2 + \frac{1}{4}(\alpha'_1 - \alpha'_2)^2.$$

En développant et factorisant, cette quantité est égale à

$$\frac{1}{4}\omega'^2(N-3)(N-6) > 0,$$

d'où le deuxième point.

3. Pour le dernier point, on a la même différence de hauteur de potentiel que le point 2, ce qui démontre ce point. □

Corollaire 3.2.25. *On peut classer les selles, pour n quelconque, selon leurs hauteurs de potentiel au premier ordre de la façon suivante :*

$$\begin{aligned} (0, 2, N-2) \succeq (1, 1, N-3) \succeq (2, 0, N-4) \succeq (0, 2, N-4) \succeq (1, 1, N-5) \succeq \dots \\ \dots \succeq (2, 0, 2) \succeq (0, 2, 2) \succeq (1, 1, 1) \end{aligned} \quad (3.2.20)$$

Nous avons maintenant une classification plus fine des hauteurs de potentiel des selles de C_1 , notre but est de pouvoir donner une classification des hauteurs de communication relative aux éléments de B_1 . Nous savons déjà qu'il n'y a pas de communication entre éléments de B_1 , donc pour passer d'un élément de B_1 à un autre élément de B_1 il faut passer par 2 selles de C_1 . De plus comme nous avons fait un choix dans le signe des valeurs de $\alpha'_0, \alpha'_1, \alpha'_2$ nous allons devoir détailler les deux règles de liaisons.

Première règle Soient $x \in B_1$ et $i, j \in \llbracket 1, N \rrbracket$ tel que $x_i \neq x_j$. Supposons, quitte à changer i et j , que $x_i = 1$ et $x_j = -1$. Posons x' le N -uplet x dont les coordonnées x_i et x_j sont permutées et $\gamma = (I_{1/-1}^x(i), I_{1/-1}^x(j))$. Soient $y, z \in C_1$ les deux selles qui permettent de passer de x à x' . On a :

$$\begin{aligned} \forall k \notin \{i, j\}, y_k = z_k = \begin{cases} \alpha'_1 & \text{si } x_k = 1 \\ \alpha'_2 & \text{si } x_k = -1 \end{cases} \\ y_i = z_j = \alpha'_0 \text{ et } y_j = z_i = \alpha'_2 \end{aligned} \quad (3.2.21)$$

Si i et j ne sont pas voisins, on a la relation suivante ainsi que la table des interfaces de y et z :

$$\begin{aligned} I_{1/-1}(x) - I_{1/-1}^x(i) - I_{1/-1}^x(j) &= I_{\alpha'_1/\alpha'_2}(y) - I_{\alpha'_1/\alpha'_2}^y(i) - I_{\alpha'_1/\alpha'_2}^y(j) \\ &= I_{\alpha'_1/\alpha'_2}(z) - I_{\alpha'_1/\alpha'_2}^z(i) - I_{\alpha'_1/\alpha'_2}^z(j) \end{aligned} \quad (3.2.22)$$

i et j non voisins

γ	$I_{\alpha'_1/\alpha'_2}^y(i)$	$I_{\alpha'_1/\alpha'_2}^y(j)$	$I_{\alpha'_1/\alpha'_2}(y)$	$I_{\alpha'_0/\alpha'_1}(y)$	$I_{\alpha'_0/\alpha'_2}(y)$
(0, 0)	0	0	p	2	0
	2	0	$p+2$	0	2
(0, 1)	0	1	p	2	0
	2	0	$p+1$	1	1
(0, 2)	0	2	p	2	0
	2	0	p	2	0
(1, 0)	0	0	$p-1$	1	1
	1	0	p	0	2
(1, 1)	0	1	$p-1$	1	1
	1	0	$p-1$	1	1
(1, 2)	0	2	$p-1$	1	1
	1	0	$p-2$	2	0
(2, 0)	0	0	$p-2$	0	2
	0	0	$p-2$	0	2
(2, 1)	0	1	$p-2$	0	2
	0	0	$p-3$	1	1
(2, 2)	0	2	$p-2$	0	2
	0	0	$p-4$	2	0

Si i et j sont voisins, on a la relation suivante ainsi que la table des interfaces de y et z :

$$\begin{aligned}
 I_{1/-1}(x) - I_{1/-1}^x(i) - I_{1/-1}^x(j) + 1 &= I_{\alpha'_1/\alpha'_2}(y) - I_{\alpha'_1/\alpha'_2}^y(i) - I_{\alpha'_1/\alpha'_2}^y(j) \\
 &= I_{\alpha'_1/\alpha'_2}(z) - I_{\alpha'_1/\alpha'_2}^z(i) - I_{\alpha'_1/\alpha'_2}^z(j)
 \end{aligned} \tag{3.2.23}$$

i et j voisins

γ	$I_{\alpha'_1/\alpha'_2}^y(i)$	$I_{\alpha'_1/\alpha'_2}^y(j)$	$I_{\alpha'_1/\alpha'_2}(y)$	$I_{\alpha'_0/\alpha'_1}(y)$	$I_{\alpha'_0/\alpha'_2}(y)$
(1, 1)	0	0	$p-1$	1	1
	1	0	p	0	2
(1, 2)	0	1	$p-1$	1	1
	1	0	$p-1$	1	1
(2, 1)	0	0	$p-2$	0	2
	0	0	$p-2$	0	2
(2, 2)	0	1	$p-2$	0	2
	0	0	$p-3$	1	1

Deuxième règle Soient $x \in B_1$ et $i, j \in [1, N]$. Supposons, quitte à changer i et j , que $x_i = 1$ et $x_j = -1$. Posons x' le N -uplet x donc les coordonnées x_i et x_j sont permutées et $\gamma = (I_{1/-1}^x(i), I_{1/-1}^x(j))$. Soient $y, z \in C_1$ les deux selles qui permettent de passer de x à x' . On a :

$$\begin{aligned}
 \forall k \neq i, j \quad y_k = z_k &= \begin{cases} -\alpha'_2 & \text{si } x_k = 1 \\ -\alpha'_1 & \text{si } x_k = -1 \end{cases} \\
 y_i = z_j &= -\alpha'_2 \text{ et } y_j = z_i = -\alpha'_0
 \end{aligned} \tag{3.2.24}$$

Si i et j ne sont pas voisins, on a la relation suivante ainsi que la table des interfaces de y et z :

$$\begin{aligned}
 I_{1/-1}(x) - I_{1/-1}^x(i) - I_{1/-1}^x(j) &= I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}(y) - I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^y(i) - I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^y(j) \\
 &= I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}(z) - I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^z(i) - I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^z(j)
 \end{aligned} \tag{3.2.25}$$

i et j non voisins

γ	$I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^y(i)$	$I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^y(j)$	$I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^y(y)$	$I_{-\alpha'_0/-\alpha'_1}^y(y)$	$I_{-\alpha'_0/-\alpha'_2}^y(y)$
(0, 0)	0	0	p	2	0
	0	2	$p+2$	0	2
(0, 1)	0	0	$p-1$	1	1
	0	1	p	0	2
(0, 2)	0	0	$p-2$	0	2
	0	0	$p-2$	0	2
(1, 0)	1	0	p	2	0
	0	2	$p+1$	1	1
(1, 1)	1	0	$p-1$	1	1
	0	1	$p-1$	1	1
(1, 2)	1	0	$p-2$	0	2
	0	0	$p-3$	1	1
(2, 0)	2	0	p	2	0
	0	2	p	2	0
(2, 1)	2	0	$p-1$	1	1
	0	1	$p-2$	2	0
(2, 2)	2	0	$p-2$	0	2
	0	0	$p-4$	2	0

Si i et j sont voisins, on a la relation suivante ainsi que la table des interfaces de y et z :

$$\begin{aligned}
 I_{1/-1}(x) - I_{1/-1}^x(i) - I_{1/-1}^x(j) + 1 &= I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}(y) - I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^y(i) - I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^y(j) \\
 &= I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}(z) - I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^z(i) - I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^z(j)
 \end{aligned} \tag{3.2.26}$$

i et j voisins

γ	$I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^y(i)$	$I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^y(j)$	$I_{-\alpha'_1/-\alpha'_2}^y(y)$	$I_{-\alpha'_0/-\alpha'_1}^y(y)$	$I_{-\alpha'_0/-\alpha'_2}^y(y)$
(1, 1)	0	0	$p-1$	1	1
	0	1	p	0	2
(1, 2)	0	0	$p-2$	0	2
	0	0	$p-2$	0	2
(2, 1)	1	0	$p-1$	1	1
	0	1	$p-1$	1	1
(2, 2)	1	0	$p-2$	0	2
	0	0	$p-3$	1	1

Interface de la selle Grâce aux deux paragraphes précédents on peut en déduire un tableau des interfaces de la selle s (avec $\gamma' = (I_{\alpha'_0/\alpha'_1}(s), I_{\alpha'_0/\alpha'_2}(s), I_{\alpha'_0/\alpha'_2}(s))$) par rapport aux interfaces changées :

i et j non voisins

γ	(0, 0)	(1, 0) ou (0, 1)	(1, 1)	(2, 0) ou (0, 2)	(2, 1) ou (1, 2)	(2, 2)
γ'	(0, 2, $p+2$)	(0, 2, p)	(1, 1, $p-1$)	(0, 2, $p-2$)	(0, 2, $p-2$)	(0, 2, $p-2$)

i et j voisins

γ	(1, 1)	(2, 1) ou (1, 2)	(2, 2)
γ'	(0, 2, p)	(0, 2, $p-2$)	(0, 2, $p-2$)

Graphe de communication réduit aux interfaces

Théorème 3.2.26. *La hiérarchie sur B_1 est :*

$$2 \succ 4' \succ 6' \succ \dots \succ \frac{N'}{2} \succ 4 \succ 6 \succ \dots \succ N, \tag{3.2.27}$$

où ces nombres sont les interfaces et ceux où il y a un "prime" signifie que quelque soit la permutation de coordonnées, on garde toujours le même nombre d'interfaces.

Pour montrer ce théorème, il nous faut montrer trois choses. Tout d'abord montrer que la hauteur de la selle entre un élément d'interface p vers un élément d'interface plus petite que p est décroissante. Puis que cette hauteur pour $p = 4$ est plus petite que la hauteur de la selle entre un élément d'interface $\frac{N'}{2}$ vers un élément d'interface $\frac{N'}{2}$ ou $\frac{N}{2}$. Et pour terminer, que la hauteur de la selle entre un élément d'interface p' vers un élément d'interface p' ou p est décroissante.

Ce qui correspond aux trois propositions suivantes.

Proposition 3.2.27. *La hauteur de la selle entre un élément d'interface p vers un élément d'interface plus petite que p est décroissante.*

Démonstration. Un élément d'interface p qui peut communiquer vers un élément d'interface plus petite que p passe par une selle d'interface $(0, 2, p - 2)$. Donc à l'ordre un la hauteur est :

$$\begin{aligned} 2(\alpha'_0 - \alpha'_2)^2 + (p - 2)(\alpha'_1 - \alpha'_2)^2 - 4p &= \omega'^2(2(\frac{N}{2} - 3)^2 + (p - 2)(N - 3)^2) - 4p \\ &= \omega'^{-1}(-\frac{3}{2}N^2 + 6N - p) \end{aligned}$$

C'est une fonction affine et décroissante en p donc le résultat est vérifié. \square

Proposition 3.2.28. $\omega'^{-1}(-\frac{3}{2}N^2 + 6N - 12) < \omega'^{-1}(-\frac{1}{2}n^2 + \frac{3}{2}N)$

Démonstration. La hauteur, à l'ordre un, d'un élément d'interface $\frac{N'}{2}$ vers un élément d'interface $\frac{N'}{2}$ ou $\frac{N}{2}$ est :

$$\begin{aligned} (\alpha'_0 - \alpha'_2)^2 + (\alpha'_1 - \alpha'_2)^2 + (\frac{N}{2} - 1)(\alpha'_1 - \alpha'_2)^2 - 4\frac{N}{2} \\ = \omega'^{-1}(-\frac{1}{2}N^2 + \frac{3}{2}N) \end{aligned}$$

Donc :

$$\omega'^{-1}(-\frac{1}{2}N^2 + \frac{3}{2}N) - \omega'^{-1}(-\frac{3}{2}N^2 + 6N - 12) = \omega'^{-1}(N^2 - \frac{9}{2}N + 12)$$

Le polynôme $(N^2 - \frac{9}{2}N + 12)$ n'admet pas de racine réelle d'où le résultat. \square

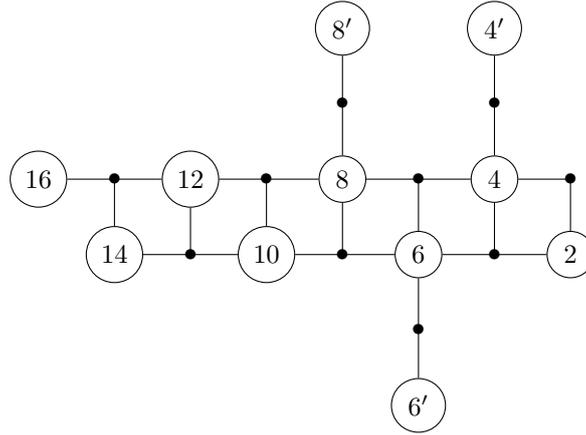
Proposition 3.2.29. *La hauteur de communication entre un élément d'interface p' vers un élément d'interface p' ou p est décroissante en p .*

Démonstration. Un élément d'interface p' qui communique vers un élément d'interface p' ou p passe par une selle d'interface $(1, 1, p - 1)$. Donc à l'ordre un la hauteur est :

$$\begin{aligned} (\alpha'_0 - \alpha'_2)^2 + (\alpha'_1 - \alpha'_2)^2 + (p - 1)(\alpha'_1 - \alpha'_2)^2 - 4p \\ = \omega'^{-1}(-\frac{1}{2}N^2 + 3N - 3p) \end{aligned}$$

C'est une fonction affine et décroissante en p donc le résultat est vérifié. \square

Nous pouvons résumer ceci avec l'exemple pour $N = 16$:



3.3 Cas $N = 8$

Nous allons maintenant considérer l'illustration non triviale qui est le cas où $N = 8$. On a par le théorème 3.1.6 que seuls les triplets critiques de la forme $(0, a_1, a_2)$ avec $2a_1 > a_2$ et $a_1 + a_2 = 8$ nous donne des minima locaux et que seuls les triplets critiques de la forme $(1, a_1, a_2)$ avec $2a_1 > a_2 + 1$ et $1 + a_1 + a_2 = 8$ nous donne des points critiques d'indice de selle 1. De plus, en utilisant la formule (3.1.19) nous avons l'expression de chacune des coordonnées. Donc, nous avons la classification suivante :

- le triplet critique $(0, 4, 4)$ nous donne $\binom{8}{4} = 70$ minima locaux, avec 4 coordonnées égales à $1 + \mathcal{O}(\gamma)$ et les 4 autres égales à $-1 + \mathcal{O}(\gamma)$;
- le triplet critique $(0, 3, 5)$ nous donne $\binom{8}{3} = 112$ minima locaux, avec 3 coordonnées égales à $\pm\alpha = \pm\frac{5}{\sqrt{19}} + \mathcal{O}(\gamma)$ et les 5 autres égales à $\pm\beta = \mp\frac{3}{\sqrt{19}} + \mathcal{O}(\gamma)$;
- le triplet critique $(0, 3, 5)$ nous donne $2\frac{8!}{113!4!} = 560$ selles d'indice 1, avec 1 coordonnée égale à $\mp\frac{1}{\sqrt{7}} + \mathcal{O}(\gamma)$, 3 autres égales à $\pm\frac{3}{\sqrt{7}} + \mathcal{O}(\gamma)$ et les 4 autres égales à $\mp\frac{2}{\sqrt{7}} + \mathcal{O}(\gamma)$.

Nous constatons donc bien l'amélioration entre la méthode du chapitre 2 et celle du chapitre 3, car nous pouvons donner une classification des minima locaux et des selles d'indice 1 ainsi que donner l'expression des coordonnées de ceux-ci.

Nous avons vu dans la proposition 3.2.1 que l'ensemble des chemins possibles sont de la forme

$$(0, 4, 4) \leftrightarrow (1, 3, 4) \leftrightarrow (0, 3, 5).$$

Contrairement aux cas $N = 2$ ou $N = 4$, dans lesquelles nous pouvions faire assez aisément le graphe des liaisons à cause du nombre faible de sommets et d'arêtes, ici nous avons un total de 182 minima locaux et 560 selles d'indice 1, il serait donc très pénible (voir infaisable) de faire un graphe des liaisons aussi simple que les cas précédents.

Nous introduirons donc dans le chapitre 4 suivant un moyen assez efficace pour donner le graphe des liaisons basé sur les orbites des actions de groupes.

Chapitre 4

Processus de saut markovien

Comme nous l'avons précisé dans l'introduction (section 1.3), il est très fréquent de discrétiser en mathématique. Nous allons alors nous intéresser à un processus de saut Markovien, que nous définirons dans la section 4.1.

Nous le regarderons, dans la sous-section 4.1.1, dans le cas sans symétries. Nous donnerons l'analogie du Théorème 1.2.8 pour les processus de saut, ainsi qu'un algorithme avec son cout (sous-section 4.1.2) pour trouver les exposants d'Arrhenius et préfacteurs des valeurs propres du générateur du processus.

Puis, dans la sous-section 4.1.3, nous le regarderons dans le cas avec des symétries. Nous introduirons les éléments nécessaires pour notre théorie, en utilisant des notions la théorie des représentations des groupes finies (voir l'annexe A pour les preuves des notions que nous utilisons de cette théorie).

Ensuite, dans la section 4.2, nous donnerons les résultats obtenus dans le cas symétrique (dont les démonstrations se trouvent dans la section 4.3).

Pour finir, dans les sections 4.4 et 4.5, nous illustrerons ces résultats avec le potentiel V_γ défini dans (1.3.1), en dimension 4 et 8.

4.1 Définitions

Soient \mathcal{X} un ensemble fini, L le générateur d'un processus de saut Markovien sur \mathcal{X} . Supposons que les éléments de L peuvent être écrits de la manière suivante :

$$L_{ij} = \frac{c_{ij}}{m_i} e^{-h_{ij}/\varepsilon}, \quad i, j \in \mathcal{X}, i \neq j, \quad (4.1.1)$$

où $\varepsilon > 0$, $c_{ij} = c_{ji} > 0$, $m_i > 0$ et $0 < h_{ij} \leq +\infty$ que l'on appellera hauteur de communication de l'état i à l'état j en 1-pas (on conviendra d'écrire $h_{ij} = +\infty$ dans le cas où $L_{ij} = 0$). De plus, supposons qu'il existe une fonction $V : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}_+$ telle que L est réversible par rapport à la mesure $m e^{-V/\varepsilon}$:

$$m_i e^{-V_i/\varepsilon} L_{ij} = m_j e^{-V_j/\varepsilon} L_{ji} \quad \forall i, j \in \mathcal{X}. \quad (4.1.2)$$

Comme on a supposé que $c_{ij} = c_{ji}$, cela est équivalent à :

$$V_i + h_{ij} = V_j + h_{ji} \quad \forall i, j \in \mathcal{X}. \quad (4.1.3)$$

Notre but est de comprendre le comportement quand $\varepsilon \rightarrow 0$ du processus de saut Markovien X_t de générateur L , quand L est invariant sous un groupe G de bijections $g : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$.

Soit $\mathcal{G} = (\mathcal{X}, E)$ le graphe non orienté avec l'ensemble d'arête $E = \{(i, j) \in \mathcal{X}^2 : L_{ij} > 0\}$. on conviendra d'associer à une arête $e = (i, j) \in E$ la *hauteur de la selle entre i et j* définie par $V_e = V_i + h_{ij} = V_j + h_{ji}$, et d'écrire $c_e = c_{ij} = c_{ji}$. En particulier, cette convention justifie la représentation graphique utilisée, par exemple, dans la Figure 4.1 ci-après, dans laquelle on dessine une fonction $V(x)$ avec les minima locaux à hauteur V_i et les selles à hauteur V_e .

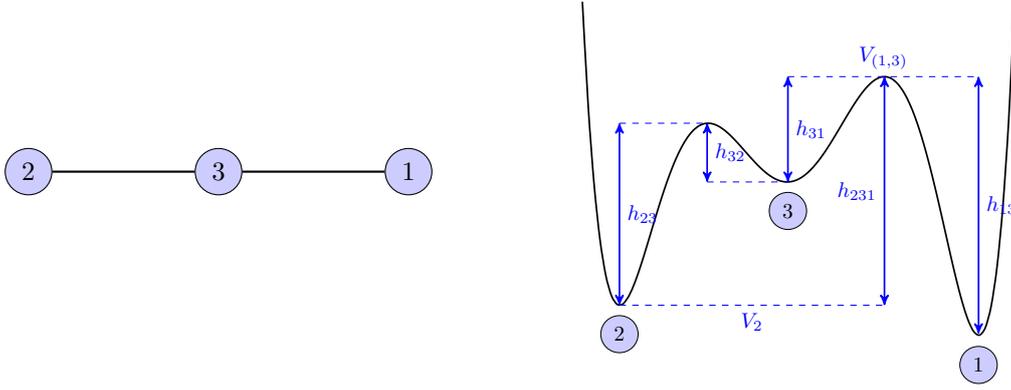


FIGURE 4.1. Le graphe \mathcal{G} et le potentiel viennent de l'exemple 4.1.2. La hauteur de communication $H(2,1)$ de l'état 2 à l'état 1 est donnée par $h_{231} = V_{(1,3)} - V_2$.

Une méthode largement utilisée pour déterminer le comportement logarithmique des valeurs propres λ_k du générateur L repose sur les W -graphes [37]. Pour un sous ensemble $W \subset \mathcal{X}$ donné, un W -graphe est un graphe orienté avec l'ensemble de sommets \mathcal{X} , tel que tout point $i \in \mathcal{X} \setminus W$ est l'origine de exactement un chemin finissant en un point $j \in W$. Puis on a :

$$H_k = - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon \log(-\lambda_k) = V^{(k)} - V^{(k+1)}, \quad (4.1.4)$$

où chaque $V^{(k)}$ implique un minimum sur tous les W -graphes avec k éléments. La quantité à minimiser est la somme de h_{ij} sur toutes les arêtes du graphe. Ceci est l'analogie à temps continu de [16, Theorem 7.3], voir par exemple [12, Section 4.3]. Cependant, notre objectif est de déterminer le préfacteur de Kramers des valeurs propres, c'est à dire d'obtenir la constante :

$$C_k = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (-\lambda_k) e^{H_k/\varepsilon}. \quad (4.1.5)$$

Dans le cas général, c'est à dire quand les différentes hauteurs de communication relevante sont toutes différentes, le coefficient C_k peut être déterminé du graphe \mathcal{G} , des notions de hauteur de communication et de la hiérarchie métastable (que nous définirons dans la sous-section suivante, voir aussi [9, 10]). Nous allons expliquer cette approche dans les deux prochaines sous-sections, avant de regarder le cas plus difficile où le générateur L est invariant sous un groupe de symétrie.

4.1.1 Cas asymétrique et résultats

Définition 4.1.1 (Hauteur de communication). *Soit $i \neq j \in \mathcal{X}$. Pour $p \geq 1$, la hauteur de communication en $(p+1)$ -pas de i à j , passant par les états k_1, \dots, k_p , est définie par*

$$h_{ik_1 \dots k_p j} = h_{ik_1 \dots k_p} \vee (h_{ik_1} - h_{k_1 i} + h_{k_1 k_2} - h_{k_2 k_1} + \dots + h_{k_p j}) \quad (4.1.6)$$

(voir la Figure 4.1). La hauteur de communication de i à $j \neq i$ est définie par

$$H(i, j) = \min_{\gamma: i \rightarrow j} h_\gamma, \quad (4.1.7)$$

où le minimum est sur tous les chemins $\gamma = (i, k_1, \dots, k_p, j)$ de taille $p+1 \geq 1$. Un chemin réalisant le minimum dans (4.1.7) est appelé un chemin optimal de i à j . Si $i \notin A \subset \mathcal{X}$, On définit la hauteur de communication de i à A de la manière suivante

$$H(i, A) = \min_{j \in A} H(i, j). \quad (4.1.8)$$

En utilisant (4.1.3) et (4.1.6), il est facile de montrer que les hauteurs de communication peuvent être définies, de manière équivalente, au sens des hauteurs de selle par

$$h_{ik_1 \dots k_p j} + V_i = V_{(i, k_1)} \vee V_{(k_1, k_2)} \vee \dots \vee V_{(k_p, j)}. \quad (4.1.9)$$

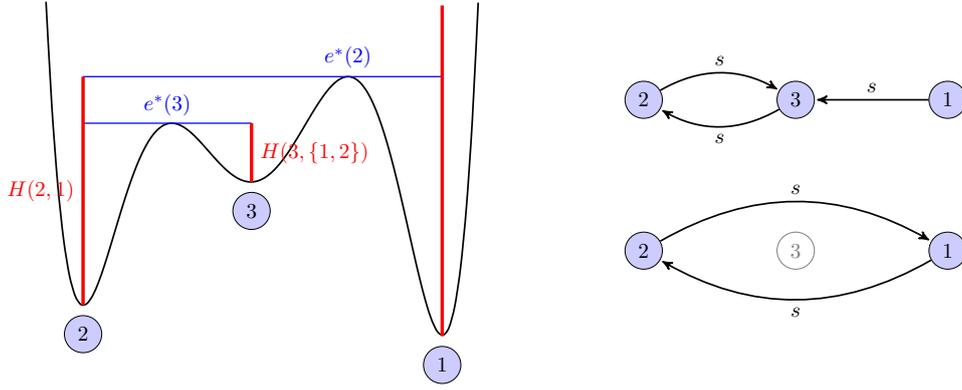


FIGURE 4.2. Arbres des successeurs et hiérarchie métastable pour l'exemple 4.1.2. L'état 3 est en haut d'un 2-cycle dans le graphe des successeurs, et il est effacé après une étape. L'état 2 est en haut d'un 2-cycle dans le graphe des successeurs à la deuxième étape. L'exposant d'Arrhenius des valeurs propres sont les longueurs des segments verticaux rouges. Le segment de droite est considéré comme infiniment long et correspond à la valeur propre 0. L'arbre de successeurs est constitué du graphe des successeurs du système original, et du graphe des successeurs pour le système dans lequel l'état 3 a été enlevé.

Alors $H(i, j) + V_i$ est le minimum sur tous les chemins γ de i à j de la hauteur de selle maximale rencontrer le long de γ .

Exemple 4.1.2. Considérons le générateur

$$L = \begin{pmatrix} -\frac{c_{13}}{m_1} e^{-h_{13}/\varepsilon} & 0 & \frac{c_{13}}{m_1} e^{-h_{13}/\varepsilon} \\ 0 & -\frac{c_{23}}{m_2} e^{-h_{23}/\varepsilon} & \frac{c_{23}}{m_2} e^{-h_{23}/\varepsilon} \\ \frac{c_{13}}{m_3} e^{-h_{31}/\varepsilon} & \frac{c_{23}}{m_3} e^{-h_{32}/\varepsilon} & -\frac{c_{13}}{m_3} e^{-h_{31}/\varepsilon} - \frac{c_{23}}{m_3} e^{-h_{32}/\varepsilon} \end{pmatrix} \quad (4.1.10)$$

en supposant $h_{32} < h_{31}$, $h_{32} < h_{23}$ et $h_{23} - h_{32} + h_{31} < h_{13}$. Le graphe et le potentiel associés sont montrés dans la Figure 4.1. Nous avons, par exemple,

$$h_{231} = h_{23} \vee (h_{23} - h_{32} + h_{31}) = h_{23} - h_{32} + h_{31} = V_{(1,3)} - V_2, \quad (4.1.11)$$

qui est la différence de hauteur entre l'état 2 et la selle reliant l'état 1 et 3. La hauteur de communication de 2 à 1 est donnée par

$$H(2, 1) = h_{21} \wedge h_{231} = h_{231}, \quad (4.1.12)$$

car $h_{21} = +\infty$, et les chemins de longueur plus grande que 3 ont un cout plus grand ou égal, car ils sont soit égaux à h_{21} soit égaux à h_{231} . En faisant pareil pour les autres hauteurs de communication, on obtient que la matrice des $H(i, j)$ est donnée par

$$\begin{pmatrix} * & h_{13} & h_{13} \\ h_{231} & * & h_{23} \\ h_{31} & h_{32} & * \end{pmatrix}. \quad (4.1.13)$$

L'hypothèse suivante est la condition nécessaire pour être dans ce que l'on appelle le *cas asymétrique*. C'est une forme faible d'hypothèses semblables, trouvée par exemple dans [16, Section 6.7], [22, p. 225] ou [11, Hypothèse 1].

Hypothèse 4.1.3 (Hiérarchie métastable). Les éléments de $\mathcal{X} = \{1, \dots, n\}$ peuvent être ordonnés tels que si $\mathcal{M}_k = \{1, \dots, k\}$,

$$H(k, \mathcal{M}_{k-1}) \leq \min_{i < k} H(i, \mathcal{M}_k \setminus \{i\}) - \theta, \quad k \in \{2, \dots, n\} \quad (4.1.14)$$

pour un certain $\theta > 0$. On appellera les hauteurs $H(k, \mathcal{M}_{k-1})$ pour $k \in \{2, \dots, n\}$ les *hauteurs de communication relevantes*. On dira alors que l'ordre $1 \prec 2 \prec \dots \prec n$ définit la *hiérarchie métastable* de \mathcal{X} (voir la Figure 4.2). De plus, pour chaque k il existe une unique arête $e^*(k)$ telle que n'importe quel chemin optimal $\gamma : k \rightarrow \mathcal{M}_{k-1}$ atteint la hauteur $H(k, \mathcal{M}_{k-1}) + V_k$ seulement en l'arête $e^*(k)$. Enfin, n'importe quel chemin non optimal $\gamma : k \rightarrow \mathcal{M}_{k-1}$ atteint au plus la hauteur $V_{e^*(k)} + \theta$.

La condition (4.1.14) signifie que dans la partie triangulaire inférieure de la matrice de hauteur de communication $H(i, j)$, le minimum de chaque ligne est plus petit, d'au moins θ , que le minimum des lignes au-dessus. Typiquement, un tel ordre existe seulement si L n'admet pas de groupe de symétrie non trivial.

Exemple 4.1.4. Revenons à l'exemple précédent, on voit que $H(3, \{1, 2\}) = h_{32}$ est plus petit que $H(1, \{2, 3\}) = h_{13}$ et $H(2, \{1, 3\}) = h_{23}$. De plus, $H(2, \{1\}) = h_{231}$ est plus petit que $H(1, \{2\}) = h_{13}$. Alors le système admet un ordre métastable donné par $1 \prec 2 \prec 3$ (voir la Figure 4.2), où

$$\theta = \min(h_{13} - h_{32}, h_{23} - h_{32}, h_{13} - h_{213}).$$

Les plus hautes arêtes associées sont $e^*(3) = (2, 3)$ et $e^*(2) = (1, 3)$.

Notons que les hauteurs de communication relevante $H(k, \mathcal{M}_{k-1})$ sont en fait données par le minimum de la ligne correspondante dans la partie triangulaire inférieure de la matrice (4.1.13). On verra dans la prochaine sous section un algorithme permettant de déterminer l'ordre métastable de manière efficace.

Le résultat suivant est équivalent à [10, Théorème 1.2], mais nous donnerons une nouvelle démonstration qui sera nécessaire pour le cas symétrique.

Théorème 4.1.5 (Comportement asymptotique des valeurs propres). *Sous l'hypothèse 4.1.3, et pour ε suffisamment petit, les valeurs propres de L sont données par $\lambda_1 = 0$ et*

$$\lambda_k = -\frac{c_{e^*(k)}}{m_k} e^{-H(k, \mathcal{M}_{k-1})/\varepsilon} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], \quad k \in \{2, \dots, n\}. \quad (4.1.15)$$

De plus, soit $\tau_{\mathcal{M}_{k-1}} = \inf\{t > 0 : X_t \in \mathcal{M}_{k-1}\}$ le premier temps d'atteinte de \mathcal{M}_{k-1} . Alors pour $k \in \{2, \dots, n\}$,

$$\mathbb{E}^i[\tau_{\mathcal{M}_{k-1}}] = \frac{1}{|\lambda_k|} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})] \quad (4.1.16)$$

pour toutes valeurs initiales $i \in \mathcal{X} \setminus \mathcal{M}_{k-1}$.

Exemple 4.1.6. Ce théorème nous montre que les valeurs propres du générateur (4.1.10) sont

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0, \\ \lambda_2 &= -\frac{c_{13}}{m_2} e^{-h_{231}/\varepsilon} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], \\ \lambda_3 &= -\frac{c_{23}}{m_3} e^{-h_{32}/\varepsilon} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \end{aligned}$$

Bien sur cela peut être vérifié par un calcul explicite dans ce cas simple. L'intérêt du Théorème 4.1.5 est qu'il fonctionne pour un système arbitrairement grand, à un coup de calcul relativement modeste.

4.1.2 Algorithme asymétrique

Notons $n = |\mathcal{X}|$ le nombre d'états, et $m = |E|$ le nombre d'arêtes de \mathcal{G} . Comme on a supposé que la chaîne soit irréductible, on a $n - 1 \leq m \leq \frac{1}{2}n(n - 1)$. Remarquons que le nombre de W -graphes possible sur \mathcal{X} est au moins 2^n (le nombre de sous ensembles de \mathcal{X}), donc en appliquant directement (4.1.4) pour calculer les exposants H_k cela va être très long. Cependant, dans le cas réversible la méthode peut être sensiblement améliorée.

Les étapes de base d'un algorithme (présenté dans [12, Section 4.3]) déterminant la hiérarchie métastable, et par la même occasion les préfacteurs C_k et les exposants H_k sont :

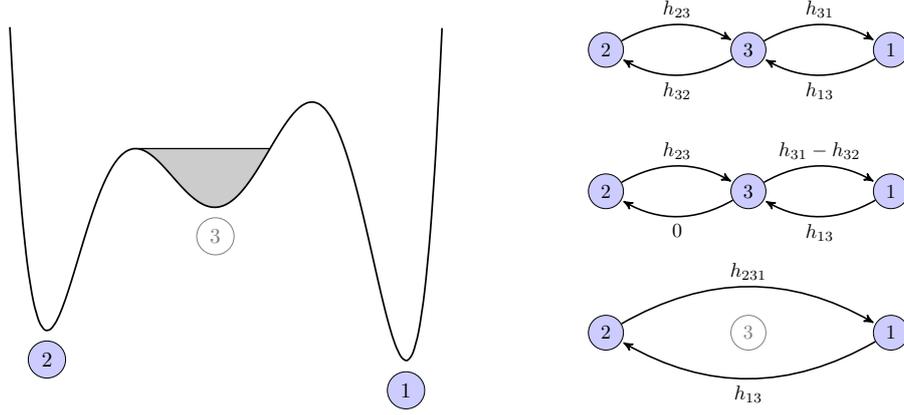


FIGURE 4.3. L'opération d'effacer un état du système peut être vu comme le fait de remplir le puits du potentiel, jusqu'à la plus petite hauteur de selle atteignable. Sur le graphe orienté avec les poids h_{ij} , cela revient à soustraire $h_{i,s(i)}$ de toutes les arêtes partant de l'état i à effacer, et remplacer tout les h_{jk} pour $j, k \neq i$ par $h_{jk} \wedge (h_{ji} + h_{ik})$.

- Trouver la plus petite hauteur de communication en 1-pas h_{ij} . L'état i sera le dernier dans la hiérarchie métastable.
- Effacer l'état i et toutes les arêtes contenant i du graphe; puis recalculer les hauteurs de communication en 1-pas, tel que pour tout $j, k \neq i$, h_{jk} est remplacé par son minimum avec h_{jik} (cf. Figure 4.3).
- Recommencer jusqu'à ce qu'il n'y ait plus d'arête.

Une manière de faire cela efficacement est la suivante. Pour tout site $i \in \mathcal{X}$, on appelle *successeur* de i n'importe quel $s(i)$ tel que

$$\inf_{j \neq i} h_{ij} = h_{is(i)}. \quad (4.1.17)$$

Si une hiérarchie métastable existe, alors le dernier site dans la hiérarchie a un unique successeur. Définissons le graphe des successeurs comme le graphe orienté avec pour ensemble de sommet \mathcal{X} et pour ensemble d'arête $i \rightarrow s(i)$ (Figure 4.2). La réversibilité implique que ce graphe ne peut avoir de cycles de longueur supérieur à 2. De plus, il doit y avoir au moins un cycle de longueur 2. Si (i, j) est un 2-cycle et $V_i < V_j$, on dira que i est en bas du cycle et j est en haut du cycle. Les étapes de notre algorithme sont

- Déterminer le graphe des successeurs.
- Trouver tous les cycles de longueur 2. Déterminer le haut de chaque cycle. Effacer tous les états qui sont en haut d'un cycle et l'arête correspondante, et recalculer les h_{jk} comme dans la deuxième étape de l'algorithme précédent.
- Recommencer jusqu'à ce qu'il n'y ait plus d'arête.

Cette algorithme mène à ce que l'on appellera *arbre des successeurs*, qui nous donnera la hiérarchie métastable. Les feuilles de l'arbre sont les états de \mathcal{X} . Deux branches se rejoignent quand elles appartiennent à un 2-cycle à une certaine étape de l'algorithme. En calculant pour chaque i en haut d'un cycle la hauteur $V_{(i,s(i))} - V_i$ puis en les ordonnant on obtient la hiérarchie métastable (sachant que le seul état non effacé est le premier de la hiérarchie). Ainsi l'exposant d'Arrhenius et l'arête $e^*(k)$ déterminant le préfacteur C_k peuvent être lu sur l'arbre des successeurs (Figure 4.2).

L'algorithme des valeurs propres de Jacobi permet de diagonaliser une matrice symétrique quelconque en $\mathcal{O}(n^3)$ étapes (voir [35]). Le cout de calcul de l'algorithme précédent, en revanche, est entre $\mathcal{O}(m)$ et $\mathcal{O}(n^2)$ au plus. En effet, le graphe des successeurs peut être déterminé en trouvant, pour chaque $i \in \mathcal{X}$, le minimum des h_{ij} , qui requiers $2m$ étapes. Le cout pour déterminer tous les 2-cycles est d'ordre n donc par conséquent négligeable. Finalement, recalculer les hauteurs de communication du graphe des successeurs a un cout de $\mathcal{O}(n)$ au plus, et doit être fait pour $n - 1$ états au total. Comme $2m < n^2$, on en déduit bien le cout de l'algorithme.

Un algorithme alternatif pour déterminer la hiérarchie métastable est évoqué dans [11]. Bien qu'il ait été fait afin de déterminer uniquement les exposants H_k , le théorème 4.1.5 montre qu'il

peut être utilisé aussi pour calculer les préfateurs C_k . L'algorithme consiste en premier lieu à trouver l'arbre recouvrant minimal du graphe (minimal en terme de hauteur de communication), puis d'enlever des arêtes de cet arbre. Le cout donné dans [11] est au moins $\mathcal{O}(n \log n)$ et au plus $\mathcal{O}(n^2)$. Comme le cout des deux algorithmes ont des bornes comparable, dans une situation spécifique l'un des deux algorithmes peut être un petit plus performant que l'autre.

4.1.3 Cas symétrique

Soit G un groupe fini de bijection $g : \mathcal{X} \rightarrow \mathcal{X}$. On notera par $\pi(g)$ la matrice de permutation

$$\pi(g)_{ab} = \begin{cases} 1 & \text{si } g(a) = b, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.1.18)$$

A partir de maintenant on suppose que le générateur L est *invariant* sous le groupe G , c'est à dire :

$$\pi(g)L = L\pi(g) \quad \forall g \in G. \quad (4.1.19)$$

C'est équivalent à supposer

$$\forall g \in G \forall a, b \in \mathcal{X} \quad L_{ab} = L_{g(a)g(b)}.$$

Rappelons quelques définitions de la théorie des groupes.

Définition 4.1.7.

1. Pour $a \in \mathcal{X}$, $O_a = \{g(a) : g \in G\} \subset \mathcal{X}$ est appelé l'orbite de a .
2. Pour $a \in \mathcal{X}$, $G_a = \{g \in G : g(a) = a\} \subset G$ est appelé le stabilisateur de a .
3. Pour $g \in G$, $\mathcal{X}^g = \{a \in \mathcal{X} : g(a) = a\} \subset \mathcal{X}$ est appelé l'ensemble des points fixes de g .

Rappelons des propriétés et propositions bien connues :

- Les orbites forment une partition de \mathcal{X} , noté \mathcal{X}/G .
- Pour tout $a \in \mathcal{X}$, le stabilisateur G_a est un sous groupe de G .
- Pour tout $a \in \mathcal{X}$, l'application $\varphi : gG_a \mapsto g(a)$ donne une bijection de G/G_a dans l'orbite O_a de a , et donc $|G|/|G_a| = |O_a|$.
- Pour tout $g \in G$ et tout $a \in \mathcal{X}$, on a $G_{g(a)} = gG_ag^{-1}$, c'est à dire que les stabilisateurs sont tous conjugués.
- *Lemme de Burnside* : $\sum_{g \in G} |\mathcal{X}^g| = |G| |\mathcal{X}/G|$.

On notera les orbites de G par A_1, \dots, A_{n_G} . La valeur de la hauteur de communication $H(a, A_j)$ est la même pour tout $a \in A_i$, on la notera donc $H(A_i, A_j)$. De même, on écrira V_{A_i} pour la valeur commune de tous les V_a , $a \in A_i$. Nous ferons les deux hypothèses de non-dégénérescence suivantes :

Hypothèse 4.1.8 (Hiérarchie métastable pour les orbites). Soient $\mathcal{M}_k = A_1 \cup \dots \cup A_k$ pour $k \in \{1, \dots, n_G\}$. On peut ordonner les orbites telles que

$$H(A_k, \mathcal{M}_{k-1}) \leq \min_{i < k} H(A_i, \mathcal{M}_k \setminus A_i) - \theta, \quad k \in \{2, \dots, n_G\} \quad (4.1.20)$$

pour un certain $\theta > 0$. On le notera $A_1 \prec A_2 \prec \dots \prec A_{n_G}$. De plus, pour tout $k \in \{2, \dots, n_G\}$, il existe une seule arête $e^*(k) \in E$ telle que

$$H(A_k, \mathcal{M}_{k-1}) + V_{A_k} = V_{(a,b)} \quad \Leftrightarrow \quad \exists g \in G : (g(a), g(b)) = e^*(k). \quad (4.1.21)$$

Hypothèse 4.1.9 (Absence de dégénérescence accidentelle). Chaque fois qu'il y a des éléments $a_1, b_1, a_2, b_2 \in \mathcal{X}$ tels que $h_{a_1 b_1} = h_{a_2 b_2}$, il existe $g \in G$ tel que $g(\{a_1, b_1\}) = \{a_2, b_2\}$.

Nous faisons l'hypothèse assez forte 4.1.9 principalement pour simplifier l'expression des valeurs propres ; l'approche que nous avons développé ici peut être appliqué sans cette hypothèse, en contrepartie les valeurs propres auront une expression plus compliquées. L'hypothèse 4.1.9 implique la propriété suivante sur les éléments de la matrice L :

Lemme 4.1.10. *Pour tout $a, b \in \mathcal{X}$, appartenant à des orbites différentes, $L_{ah(b)} = L_{ab}$ si et seulement si $h \in G_a G_b$.*

Démonstration. Par l'hypothèse 4.1.9, et que $g(a) \neq b$ car ils appartiennent à des orbites différentes, $L_{ah(b)} = L_{ab}$ si et seulement si il existe $g \in G$ tel que $g(a) = a$ et $g(b) = h(b)$. C'est équivalent à l'existence d'un $g \in G_a$ tel que $g(b) = h(b)$, c'est à dire $b = g^{-1}h(b)$. Cela est équivalent à $h \in G_a G_b$. \square

Les transitions directes entre deux orbites A_i et A_j sont dominées par les arêtes (a, b) pour lesquelles h_{ab} est minimal. On notera la valeur minimale :

$$h^*(A_i, A_j) = \inf\{h_{ab} : a \in A_i, b \in A_j\}. \quad (4.1.22)$$

Remarque $h^*(A_i, A_j)$ peut être infini (si il n'y a pas d'arêtes entre les orbites), et que $H(A_i, A_j) \leq h^*(A_i, A_j)$. En diminuant, si nécessaire, la valeur de $\theta > 0$, on peut supposer que :

$$h_{ab} > h^*(A_i, A_j), a \in A_i, b \in A_j \Rightarrow h_{ab} \geq h^*(A_i, A_j) + \theta. \quad (4.1.23)$$

Par le Lemme 4.1.10, si $h^*(A_i, A_j)$ est fini, chaque $a \in A_i$ est relié à exactement $|G_a G_b|/|G_b|$ états dans $A_j \ni b$ avec $L_{ab} = [c_{ab}/m_a] e^{-h^*(A_i, A_j)/\varepsilon}$. Remarquons que

$$\begin{aligned} \varphi : G_a G_b / G_b &\rightarrow G_a / (G_a \cap G_b) \\ g G_b &\mapsto g(G_a \cap G_b) \end{aligned} \quad (4.1.24)$$

est une bijection, et donc le nombre n_j^a d'états dans A_j communiquant avec a peut être écrit dans l'une des deux formes équivalentes

$$n_j^a = \frac{|G_a G_b|}{|G_b|} = \frac{|G_a|}{|G_a \cap G_b|}. \quad (4.1.25)$$

L'application π définie par (4.1.18) est un morphisme de G dans $\text{GL}(n, \mathbb{C})$, et donc définit une *représentation* de G de dimension $\dim \pi = n$ (voir la Définition A.1.1). Dans ce que suit, nous allons donner les points importants de la théorie des représentations des groupes finis (pour les démonstrations voir dans l'annexe A ou [36]) :

- Une représentation de G est dite *irréductible* s'il n'y a pas de sous-espace propre de \mathbb{C}^n invariant sous tout $\pi(g)$ (voir la Définition A.1.6).
- Deux représentations π et π' de dimension d de G sont dites *équivalentes* s'il existe une matrice $S \in \text{GL}(d, \mathbb{C})$ telle que $S\pi(g)S^{-1} = \pi'(g)$ pour tout $g \in G$ (voir la Définition A.1.16).
- Tout groupe fini G possède un nombre fini de représentation irréductible non équivalente $\pi^{(0)}, \dots, \pi^{(r-1)}$ (voir les Théorèmes A.2.22 et A.3.9 et le Corolaire A.3.10). La représentation $\pi^{(0)}$ est appelé la *représentation triviale*, $\pi^{(0)}(g) = 1 \forall g \in G$.
- Toute représentation π de G peut être décomposée en somme de représentation irréductible (voir le Théorème A.2.24) :

$$\pi = \bigoplus_{p=0}^{r-1} \alpha^{(p)} \pi^{(p)}, \quad \alpha^{(p)} \geq 0, \quad \sum_{p=0}^{r-1} \alpha^{(p)} \dim(\pi^{(p)}) = \dim(\pi) = n. \quad (4.1.26)$$

Cela veut dire qu'on peut trouver une matrice $S \in \text{GL}(n, \mathbb{C})$ telle que toutes les matrices $S\pi(g)S^{-1}$ sont diagonales par blocs, avec le bloc $\alpha^{(p)}$ donné par $\pi^{(p)}(g)$. Cette décomposition est unique à l'ordre des facteurs près.

- Pour toute représentation irréductible $\pi^{(p)}$ contenue dans π , notons $\chi^{(p)}(g) = \text{Tr} \pi^{(p)}(g)$ son *caractère*. Alors

$$P^{(p)} = \frac{\dim(\pi^{(p)})}{|G|} \sum_{g \in G} \overline{\chi^{(p)}(g)} \pi(g) \quad (4.1.27)$$

est le projecteur sur le sous-espace invariant de \mathbb{C}^n associé à $\pi^{(p)}$ (voir Théorème A.5.1). En particulier,

$$\alpha^{(p)} \dim(\pi^{(p)}) = \text{Tr} P^{(p)} = \frac{\dim(\pi^{(p)})}{|G|} \sum_{g \in G} \overline{\chi^{(p)}(g)} \chi(g), \quad (4.1.28)$$

où $\chi(g) = \text{Tr } \pi(g)$ (voir Remarque A.5.2). Pour la représentation définie par (4.1.18), on a $\chi(g) = |\mathcal{X}^g|$.

Exemple 4.1.11 (Les représentations irréductibles du groupe diédral, voir aussi la section A.6). Le groupe diédral D_N est le groupe des symétries d'un polygone régulier à N -cotés. Il est engendré par r , la rotation d'angle $2\pi/N$, et s , une des réflexions préservant le polygone régulier à N -cotés. En effet

$$D_N = \{\text{Id}, r, r^2, \dots, r^{N-1}, s, rs, r^2s, \dots, r^{N-1}s\} \quad (4.1.29)$$

est entièrement déterminé par les conditions $r^N = \text{Id}$, $s^2 = \text{Id}$ et $rs = sr^{-1}$. Si N est pair, alors D_N a 4 représentations irréductibles de dimension 1, définies par $\pi(r) = \pm 1$ et $\pi(s) = \pm 1$. De plus, il a $\frac{N}{2} - 1$ représentations irréductibles de dimension 2, équivalentes à

$$\pi(r) = \begin{pmatrix} e^{2i\pi k/N} & 0 \\ 0 & e^{-2i\pi k/N} \end{pmatrix}, \quad \pi(s) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad k = 1, \dots, \frac{N}{2} - 1. \quad (4.1.30)$$

Les caractères associés sont

$$\chi(r^i s^j) = \text{Tr } \pi(r^i s^j) = 2 \cos\left(\frac{2\pi i k}{N}\right) \delta_{j0}, \quad i = 0, \dots, N-1, j = 0, 1. \quad (4.1.31)$$

Il n'y a pas de représentation irréductible de dimension plus grande que 2. Si N est impair, il y a 2 représentations irréductibles de dimension 1, définies par $\pi(r) = 1$ et $\pi(s) = \pm 1$, et $(N-1)/2$ représentations irréductibles de dimension 2.

4.2 Les résultats

L'idée centrale de notre approche est d'utiliser la décomposition (4.1.26) de la représentation de la matrice de permutation (4.1.18) du groupe de symétrie G pour caractériser les valeurs propres de L . Il résulte de (4.1.19) et de (4.1.27) que

$$P^{(p)}L = LP^{(p)}, \quad p = 0, \dots, r-1, \quad (4.2.1)$$

de sorte que les r images $P^{(p)}\mathbb{C}^n$ (où $n = |\mathcal{X}|$) sont des sous-espaces invariants pour L . Nous pouvons ainsi déterminer les valeurs propres de L en limitant l'analyse à chaque restriction $L^{(p)}$ de L aux sous-espaces $P^{(p)}\mathbb{C}^n$. Toutes les valeurs propres de L sont associées à exactement une représentation irréductible, de sorte que la procédure donnera l'ensemble du spectre de L .

Une façon équivalente de dire cela, c'est que les projecteurs $P^{(p)}$ vont nous permettre de construire une base dans laquelle L est diagonale par blocs. Chaque bloc correspond à une représentation irréductible différente. Après le calcul des éléments de matrice de chaque bloc, les valeurs propres peuvent être déterminées par l'algorithme du cas asymétrique.

4.2.1 La représentation triviale

Commençons par la restriction $L^{(0)}$ de L au sous-espace $P^{(0)}\mathbb{C}^n$ associé à la représentation triviale $\pi^{(0)}$.

Proposition 4.2.1 (Éléments de la matrice $L^{(0)}$ pour la représentation triviale). *Le sous-espace $P^{(0)}\mathbb{C}^n$ est de dimension n_G et est engendré par les vecteurs $u_i^{(0)} = 1_{A_i}$, $i = 1, \dots, n_G$. Les coefficients hors diagonaux de la matrice $L^{(0)}$ de transitions entre les orbites A_i et A_j sont donnés par*

$$L_{ij}^{(0)} := \frac{\langle u_i, Lu_j \rangle}{\langle u_i, u_i \rangle} = \frac{c_{ij}^*}{m_i^*} e^{-h^*(A_i, A_j)/\varepsilon} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], \quad (4.2.2)$$

avec

$$c_{ij}^* = \frac{c_{ab}}{|G_a \cap G_b|}, \quad m_i^* = \frac{m_a}{|G_a|}, \quad (4.2.3)$$

où $a \in A_i$ et $b \in A_j$ sont tels que $h_{ab} = h^*(A_i, A_j)$. De plus, $L^{(0)}$ est un générateur, et par conséquent ses éléments diagonaux sont

$$L_{ii}^{(0)} =: - \sum_{j \neq i} L_{ij}^{(0)}. \quad (4.2.4)$$

La base de vecteurs u_i sont les fonctions indicatrices des orbites A_i . Donc si la distribution initiale μ est uniforme sur chaque A_i , alors elle reste uniforme sur chaque A_i à tout moment. Le processus X_t est alors équivalent au processus sur $\{1, \dots, n_G\}$ dont les probabilités de transition sont données par $L^{(0)}$. En appliquant le théorème 4.1.5 du cas asymétrique à ce processus, qui est possible grâce à l'hypothèse 4.1.8, on obtient la formule de Kramers pour les valeurs propres de $L^{(0)}$ suivante :

Théorème 4.2.2 (Valeurs propres associées à la représentation triviale). *Sous les hypothèses 4.1.8 et 4.1.9, pour ε suffisamment petit, le spectre de $L^{(0)}$ est constitué de n_G valeurs propres de multiplicité 1, données par $\lambda_1^{(0)} = 0$ et*

$$\lambda_k^{(0)} = \frac{C_{i(k)j(k)}^*}{m_k^*} e^{-H(A_k, \mathcal{M}_{k-1})/\varepsilon} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], \quad k = 2, \dots, n_G, \quad (4.2.5)$$

où $i(k)$ et $j(k)$ sont tels que $e^*(k) = (a, b)$ avec $a \in A_{i(k)}$ et $b \in A_{j(k)}$ (cf (4.1.21)). De plus, pour $2 \leq k \leq n_G$, soit μ une mesure de probabilité sur $\mathcal{X} \setminus \mathcal{M}_{k-1}$ uniforme sur chaque A_j . Alors

$$\mathbb{E}^\mu [\tau_{\mathcal{M}_{k-1}}] = \frac{1}{|\lambda_k|} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \quad (4.2.6)$$

La différence principale entre la formule de Kramers (4.2.5) du cas symétrique et son équivalent (4.1.15) pour le cas asymétrique est que les valeurs propres sont multipliées par un facteur supplémentaire $|G_c|/|G_a \cap G_b|$, où $c \in A_k$, $a \in A_{i(k)}$ et $b \in A_{j(k)}$, qui représente la symétrie.

4.2.2 Autre représentation irréductible de dimension 1

Le Théorème 4.2.2 ne compte qu'un petit sous-ensemble (n_G) de valeurs propres du générateur, associées à des distributions uniformes sur chaque orbite A_i . Les autres valeurs propres de L vont être associées à la vitesse à laquelle des distributions initiales non uniformes approchent l'uniforme. Nous allons d'abord déterminer les valeurs propres associées à des représentations non triviales de dimension 1, qui sont plus facile à obtenir. Le lemme suivant montre que pour une telle représentation, seulement une partie des orbites est présente dans l'image du projecteur associé.

Lemme 4.2.3. *Soit $\pi^{(p)}$ une représentation irréductible de dimension 1 de G , soit A_i une orbite de G et soit $a \in A_i$ fixé. Notons $\pi_i(g)$ la permutation induite par $g \in G$ sur A_i et soit $P_i^{(p)}$ le projecteur associé, cf. (4.1.27). On a l'alternative suivante :*

- $\pi^{(p)}(h) = 1$ pour tout $h \in G_a$, alors $\text{Tr } P_i^{(p)} = 1$;
- $\sum_{h \in G_a} \pi^{(p)}(h) = 0$, alors $\text{Tr } P_i^{(p)} = 0$.

Appelons *active* (par rapport à la représentation $\pi^{(p)}$) les orbites A_i telles que $\text{Tr } P_i^{(p)} = 1$, et *inactive* les autres orbites. La restriction $L^{(p)}$ de L au sous-espace $P^{(p)}\mathbb{C}^n$ a une dimension égale au nombre d'orbites actives, et le résultats suivant décrit les éléments de sa matrice.

Proposition 4.2.4 (Éléments de la matrice pour une représentation irréductible de dimension 1). *Pour chaque orbite A_i fixons un élément $a_i \in A_i$. Le sous-espace $P^{(p)}\mathbb{C}^n$ est engendré par les vecteurs $(u_i^{(p)})_{A_i \text{ active}}$ qui sont*

$$(u_i^{(p)})_a = \begin{cases} \overline{\pi^{(p)}(h)} & \text{si } a = h(a_i) \in A_i, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.2.7)$$

Les coefficients hors diagonaux de la matrice $L^{(p)}$ entre deux orbites actives A_i et A_j sont donnés par

$$L_{ij}^{(p)} = \frac{\langle u_i^{(p)}, Lu_j^{(p)} \rangle}{\langle u_i^{(p)}, u_i^{(p)} \rangle} = L_{ij}^{(0)} = \frac{c_{ij}^*}{m_i^*} e^{-h^*(A_i, A_j)/\varepsilon} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \quad (4.2.8)$$

Les éléments diagonaux de la matrice $L^{(p)}$ sont donnés par

$$L_{ii}^{(p)} = L_{ii}^{(0)} - \sum_{g \in G_{a_i} \in G/G_{a_i} \setminus G_{a_i}} (1 - \pi^{(p)}(g)) L_{a_i g(a_i)}. \quad (4.2.9)$$

En utilisant l'Hypothèse 4.1.9, on peut obtenir une expression plus explicite pour les coefficients diagonaux de la matrice. Pour chaque orbite A_i , on peut définir l'unique *successeur* $s(i)$, qui est l'orbite atteignable la plus facilement en un pas partant de A_i :

$$\inf_{j \neq i} h^*(A_i, A_j) = h^*(A_i, A_{s(i)}). \quad (4.2.10)$$

En conséquence de (4.2.4), on a

$$L_{ii}^{(0)} = -\frac{c_{is(i)}^*}{m_i^*} e^{-h^*(A_i, A_{s(i)})/\varepsilon} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \quad (4.2.11)$$

Il y a différents cas à étudier, selon lesquels il est plus facile, partant de $a \in A_i$, d'atteindre un état en dehors A_i ou dans $A_i \setminus a$. Soit a^* tel que $h(a, a^*) = \inf_b h(a, b)$. Alors

$$L_{ii}^{(p)} = \begin{cases} L_{ii}^{(0)} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})] & \text{si } a^* \notin A_i, \\ -2[1 - \operatorname{Re} \pi^{(p)}(k)] L_{aa^*} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})] & \text{si } a^* = k(a) \in A_i \text{ et } k \neq k^{-1}, \\ -[1 - \pi^{(p)}(k)] L_{aa^*} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})] & \text{si } a^* = k(a) \in A_i \text{ et } k = k^{-1}. \end{cases} \quad (4.2.12)$$

La relation (4.2.9) et le fait que toutes les orbites ne sont pas actives pour une représentation non triviale irréductible de dimension 1, impliquent que la matrice $L^{(p)}$ n'est pas un générateur si $p \neq 0$. On peut tout de même ajouter un état cimetièrre à l'ensemble des orbites actives, et donc associer à $L^{(p)}$ un processus de saut Markovien *augmenté* sur ce nouvel ensemble (les orbites actives plus l'état cimetièrre). L'état cimetièrre est absorbant, qui reflète le fait que toutes les conditions initiales non nulles dans $P^{(p)}\mathbb{C}^n$ sont asymétriques et vont converger vers la distribution invariante symétrique.

Théorème 4.2.5 (Valeurs propres associées aux représentations irréductibles non triviales de dimension 1). *Soit $\pi^{(p)}$ une représentation irréductible non triviale de dimension 1 de G , et soit n_p le nombre d'orbites actives par rapport à $\pi^{(p)}$. Pour ε suffisamment petit, le spectre de $L^{(p)}$ est constitué de n_p valeurs propres de multiplicité 1. Elles peuvent être déterminées en appliquant le Théorème 4.1.5 au processus de saut Markovien augmenté défini par $L^{(p)}$, et en ignorant la valeur propre 0.*

4.2.3 Représentation irréductible de dimension 2 ou plus

Nous arrivons enfin au calcul des valeurs propres associées aux représentations irréductibles de dimension plus grande, qui est plus compliqué. Le lemme suivant est l'analogue du Lemme 4.2.3, spécifiant quelles orbites apparaissent dans l'image du projecteur associé à une représentation donnée.

Lemme 4.2.6. *Soit $\pi^{(p)}$ une représentation irréductible de G de dimension $d \geq 2$, et soit A_i une orbite de G . Notons $\pi_i(g)$ la permutation induite par $g \in G$ sur A_i , et soit $P_i^{(p)}$ le projecteur associé, cf. (4.1.27). Alors pour un $a \in A_i$ arbitraire,*

$$\operatorname{Tr}(P_i^{(p)}) = d\alpha_i^{(p)}, \quad \alpha_i^{(p)} = \frac{1}{|G_a|} \sum_{h \in G_a} \chi^{(p)}(h) \in \{0, 1, \dots, d\}. \quad (4.2.13)$$

Ici $\chi^{(p)}(h) = \operatorname{Tr} \pi^{(p)}(h)$ désigne le caractère de la représentation irréductible.

Appelons encore *active* (par rapport à la représentation irréductible $\pi^{(p)}$) les orbites pour lesquelles $\text{Tr}(P_i^{(p)}) > 0$.

Proposition 4.2.7 (Éléments de la matrice $L^{(p)}$ pour une représentation irréductible $\pi^{(p)}$ de dimension $d \geq 2$). *Le sous-espace $P^{(p)}\mathbb{C}^n$ est engendré par les vecteurs $(u_i^a)_{i=1,\dots,m,a \in A_i}$ qui ont la forme*

$$(u_i^a)_b = \begin{cases} \frac{d}{|G_a|} \sum_{g \in G_a} \overline{\chi^{(p)}(gh)} & \text{si } b = h(a) \in A_i, \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (4.2.14)$$

Les éléments de la matrice $L^{(p)}$ entre deux orbites actives A_i et A_j sont donnés par

$$\frac{\langle u_i^{h_1(a)}, Lu_j^{h_2(b)} \rangle}{\langle u_i^{h_1(a)}, u_i^{h_1(a)} \rangle} = \frac{c_{ij}^*}{\alpha_i^{(p)} m_i^*} e^{-h^*(A_i, A_j)/\varepsilon} M_{h_1(a)h_2(b)}^{(p)} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], \quad (4.2.15)$$

où $a \in A_i$, $b \in A_j$, $h_1, h_2 \in G$, et

$$M_{h_1(a)h_2(b)}^{(p)} = \frac{1}{|G_a G_b|} \sum_{g \in G_a G_b} \chi^{(p)}(h_1 g h_2^{-1}). \quad (4.2.16)$$

Les éléments diagonaux de $L^{(p)}$ sont donnés par les expressions suivantes. Soit $a \in A_i$ et soit a^* tels que $h(a, a^*) = \inf_b h(a, b)$. Alors

$$\frac{\langle u_i^{h_1(a)}, Lu_i^{h_2(a)} \rangle}{\langle u_i^{h_1(a)}, u_i^{h_1(a)} \rangle} = \begin{cases} \frac{L_{ii}^{(0)}}{\alpha_i^{(p)}} M_{h_1(a)h_2(a)}^{(p)} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})] & \text{si } a^* \notin A, \\ -\frac{L_{aa^*}}{\alpha_i^{(p)}} M_{h_1(a)h_2(a)}^{(p)} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})] & \text{si } a^* \in A, \end{cases} \quad (4.2.17)$$

où

$$M_{h_1(a)h_2(a)}^{(p)} = \frac{1}{|G_a|} \sum_{g \in G_a} \chi^{(p)}(h_1 g h_2^{-1}) \quad (4.2.18)$$

si $a^* \notin A_i$, tandis que pour $a^* = k(a) \in A_i$,

$$M_{h_1(a)h_2(a)}^{(p)} = \begin{cases} \frac{1}{|G_a|} \sum_{g \in G_a} [2\chi^{(p)}(h_1 g h_2^{-1}) - \chi^{(p)}(h_1 k g h_2^{-1}) - \chi^{(p)}(h_1 k^{-1} g h_2^{-1})] & \text{si } k \neq k^{-1}, \\ \frac{1}{|G_a|} \sum_{g \in G_a} [\chi^{(p)}(h_1 g h_2^{-1}) - \chi^{(p)}(h_1 k g h_2^{-1})] & \text{si } k = k^{-1}. \end{cases} \quad (4.2.19)$$

Afin d'appliquer ce résultat, nous avons à choisir, pour chaque orbite A_i , $d\alpha_i^{(p)}$ des vecteurs linéairement indépendants parmi les $(u_i^a)_{a \in A_i}$.

Ce résultat montre que dans une base appropriée, la matrice $L^{(p)}$ a une structure par blocs, avec un bloc $L_{ij}^{(p)}$ pour chaque paire d'orbites actives. Chaque bloc a les mêmes hauteurs en exposant dans l'exponentiel que dans le cas des représentations de dimension 1, mais les pré-facteurs sont multipliés par une matrice non triviale $M^{(p)}$ dépendant uniquement de la représentation et des stabilisateurs des deux orbites.

Afin de déterminer les valeurs propres, rappelons la Définition (4.2.10) du successeur $A_{s(i)}$ d'une orbite A_i . On définit le graphe orienté avec pour ensemble de sommet les orbites, et pour ensemble d'arêtes orientées $i \rightarrow s(i)$ (voir la Figure 4.4). L'Hypothèse 4.1.9 implique que chaque orbite est soit dans un cycle de longueur 2, soit n'est pas dans un cycle. Si i est dans un cycle de longueur 2 et $V_i < V_{s(i)}$, on dira que i est *en bas du cycle*. Nous ferons l'hypothèse suivante sur la dégénérescence :

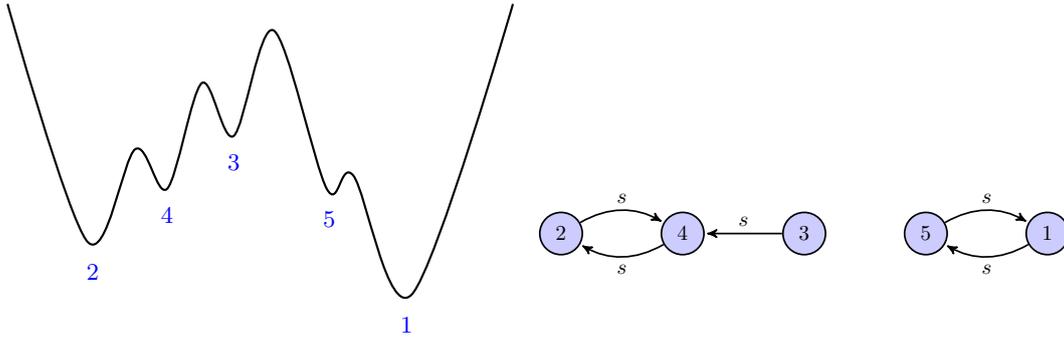


FIGURE 4.4. Exemple d'un graphe des successeurs, avec deux 2-cycles (2, 4) et (1, 5), et le potentiel associé.

Hypothèse 4.2.8. Pour chaque (i, j) un 2-cycle du graphe des successeurs, $L_{jj}^{(p)}$ est inversible et le coefficient dominant de la matrice

$$L_{ii}^{(p)} - L_{ij}^{(p)} (L_{jj}^{(p)})^{-1} L_{ji}^{(p)} \quad (4.2.20)$$

a le même exposant que le coefficient dominant de la matrice $L_{ii}^{(p)}$.

Remarquons que cette hypothèse n'est pas valide dans le cas des représentations de dimension 1 quand $j = s(i)$. La raison pour laquelle elle est valide dans le cas présent est qu'il n'y a aucune raison particulière que la matrice $L^{(p)}$ soit un générateur. En effet les sommes sur les lignes seront généralement différentes de zéro pour chaque orbite active, qui peut être considéré comme le fait que chaque orbite active communique avec un état du cimetière. Nous allons donner un exemple dans la section suivante. Sous cette hypothèse, on obtient la caractérisation des valeurs propres suivantes :

Théorème 4.2.9 (Valeurs propres associées à des représentations irréductibles de dimension $d \geq 2$). *Sous les Hypothèses 4.1.8, 4.1.9 et 4.2.8 et si ε est suffisamment petit, alors le spectre de $L^{(p)}$ est constitué, à un terme d'erreur multiplicatif près $1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})$, des*

- valeurs propres des matrices (4.2.20) pour toutes les orbites A_i telles que i est en bas d'un cycle et $s(i)$ est active ;
- valeurs propres des autres blocs diagonaux $L_{ii}^{(p)}$.

4.2.4 Trou Spectral

Tout d'abord remarquons que l'orbite de B_1 de représentant $(1, \dots, 1, -1, \dots, -1)$ communique avec l'orbite de B_2 de représentant $(\alpha', \dots, \alpha', \beta', \dots, \beta')$. L'orbite de C_1 selle entre les deux a pour représentant $(\beta, \dots, \beta, \alpha, \gamma, \dots, \gamma)$. Dans l'ordre des selles, c'est la plus basse d'entre tous et comme pour les représentations de dimension 2 toutes les orbites sont états cimetières pour les autres alors la valeur propre la plus proche de 0, pour les représentations de dimension 2, est définie par cette liaison.

Pour les représentations de dimension 1, il faut en trouver une telle que l'orbite de B_1 de représentant $(1, \dots, 1, -1, \dots, -1)$ soit active et une autre inactive.

Considérons d'abord le cas $\frac{N}{2}$ pair.

Proposition 4.2.10. *L'orbite de B_1 de représentant $(1, \dots, 1, -1, \dots, -1)$ est active si et seulement si $\mu(S) = \mu(C) = 1$.*

Démonstration. Le stabilisateur est $G = \{\text{Id}, R^{\frac{N}{2}}S, R^{\frac{N}{2}}C, SC\}$. Pour qu'elle soit active il faut

$$\mu(\text{Id}) = \mu(R^{\frac{N}{2}}S) = \mu(R^{\frac{N}{2}}C) = \mu(SC) = 1$$

Alors

$$\begin{aligned}\mu(SC) = 1 &\Leftrightarrow \mu(S)\mu(C) = 1 \Leftrightarrow \mu(S) = \mu(C) \\ \mu(R^{\frac{N}{2}}S) = 1 &\Leftrightarrow \mu(R^{\frac{N}{2}})\mu(S) = 1 \Leftrightarrow \mu(S) = 1 \\ \mu(R^{\frac{N}{2}}C) = 1 &\Leftrightarrow \mu(R^{\frac{N}{2}})\mu(C) = 1 \Leftrightarrow \mu(C) = 1\end{aligned}$$

□

La représentation + + + est la représentation triviale et toutes les orbites sont actives donc regardons la représentation - + +.

Proposition 4.2.11. *L'orbite de B_2 de représentant $(\alpha', \dots, \alpha', \beta', \dots, \beta')$ est inactive pour la représentation - + +.*

Démonstration. Le stabilisateur est $G = \{\text{Id}, R^{\frac{N}{2}-1}S\}$. On a $\mu(R^{\frac{N}{2}-1}S) = \mu(R^{\frac{N}{2}-1})\mu(S) = -1$. Elle est donc inactive. □

Donc la valeur propre la plus proche de zero pour les représentations de dimension 1, dans le cas $\frac{N}{2}$ pair, est définie par la même liaison que pour les représentations de dimension 2 (au pré-facteur près).

Considérons d'abord le cas $\frac{N}{2}$ impair.

Proposition 4.2.12. *L'orbite de B_1 de représentant $(1, \dots, 1, -1, \dots, -1)$ est active si et seulement si $\mu(R) = \mu(S) = \mu(C)$.*

Démonstration. Le stabilisateur est $G = \{\text{Id}, R^{\frac{N}{2}}S, R^{\frac{N}{2}}C, SC\}$. Pour qu'elle soit active il faut

$$\mu(\text{Id}) = \mu(R^{\frac{N}{2}}S) = \mu(R^{\frac{N}{2}}C) = \mu(SC) = 1$$

Alors

$$\begin{aligned}\mu(SC) = 1 &\Leftrightarrow \mu(S)\mu(C) = 1 \Leftrightarrow \mu(S) = \mu(C) \\ \mu(R^{\frac{N}{2}}S) = 1 &\Leftrightarrow \mu(R^{\frac{N}{2}})\mu(S) = 1 \Leftrightarrow \mu(R)\mu(S) = 1 \Leftrightarrow \mu(R) = \mu(S) \\ \mu(R^{\frac{N}{2}}C) = 1 &\Leftrightarrow \mu(R^{\frac{N}{2}})\mu(C) = 1 \Leftrightarrow \mu(R)\mu(C) = 1 \Leftrightarrow \mu(R) = \mu(C)\end{aligned}$$

□

La représentation + + + est la représentation triviale et toutes les orbites sont actives donc regardons la représentation - - -.

Proposition 4.2.13. *L'orbite de B_2 de représentant $(\alpha', \dots, \alpha', \beta', \dots, \beta')$ est inactive pour la représentation - - -.*

Démonstration. Le stabilisateur est $G = \{\text{Id}, R^{\frac{N}{2}-1}S\}$. On a $\mu(R^{\frac{N}{2}-1}S) = \mu(R^{\frac{N}{2}-1})\mu(S) = -1$. Elle est donc inactive. □

Donc la valeur propre la plus proche de zero pour les représentations de dimension 1, dans le cas $\frac{N}{2}$ impair, est définie par la même liaison que pour les représentations de dimension 2 (au pré-facteur près).

Conclusion : si on pose $V_1 = V(1, \dots, 1, -1, \dots, -1)$ et $V_2 = V(\beta, \dots, \beta, \alpha, \gamma, \dots, \gamma)$ alors, au pré-facteur près, le trou spectral est $\exp \frac{V_2 - V_1}{\epsilon}$.

4.3 Les démonstrations

4.3.1 Théorie des groupes

Dans cette sous-section, nous allons donner les démonstrations des différentes expressions des coefficients de la matrice L restreinte aux sous-espaces $P_i^{(p)}\mathbb{C}^n$ associées aux représentations irréductibles $\pi^{(p)}$. Bien que nous ayons introduit les résultats en commençant par la représentation triviale, puis de passer à d'autres représentations de dimension 1, et enfin les représentations de dimensions supérieures, il sera plus facile de donner des preuves directement dans le cas général d'une représentation irréductible quelconque de dimension d , puis de particulariser aux cas où $d = 1$ et $p = 0$.

Pour simplifier les notations, nous allons fixer une représentation irréductible $\pi = \pi^{(p)}$, des orbites $A = A_i$, $B = A_j$, et des éléments $a \in A$ et $b \in B$. Nous écrirons $\alpha_i = \alpha_i^{(p)}$ et $\chi = \chi^{(p)}$. Rappelons que $\pi_i(g)$ désigne la matrice de permutation induite par g sur l'orbite A (on considérera π_i comme une application linéaire sur \mathbb{C}^n qui est identiquement nulle sur $\mathcal{X} \setminus A$). Le projecteur associé $P_i = P_i^{(p)}$ est donné par (cf. (4.1.27))

$$P_i = \frac{d}{|G|} \sum_{g \in G} \overline{\chi(g)} \pi_i(g). \quad (4.3.1)$$

Les seuls coefficients non nuls de la matrice P_i sont ceux entre les éléments de A , et ils peuvent être écrits comme

$$(P_i)_{ah(a)} = \frac{d}{|G|} \sum_{g \in G_a} \overline{\chi(gh)} \quad \forall a \in A, \forall h \in G. \quad (4.3.2)$$

De manière similaire on notera $P_j = P_j^{(p)}$ définissant le projecteur associé à l'orbite B .

Démonstration du lemme 4.2.6. En prenant la trace de (4.3.1), on obtient

$$\alpha_i d = \text{Tr}(P_i) = \frac{d}{|G|} \sum_{g \in G} \overline{\chi(g)} \text{Tr}(\pi_i(g)). \quad (4.3.3)$$

Remarquons que $\text{Tr}(\pi_i(g)) = |A^g| = |A|1_{g \in G_a}$. donc,

$$\alpha_i = \frac{|A|}{|G|} \sum_{g \in G_a} \overline{\chi(g)} = \frac{1}{|G_a|} \sum_{g \in G_a} \overline{\chi(g)}. \quad (4.3.4)$$

Comme on a en même temps $\alpha_i \in \mathbb{N}_0$ et $\overline{\chi(g)} \in [-d, d]$, alors $\alpha_i \in [-d, d]$, on peut conclure que $\alpha_i \in \{0, 1, \dots, d\}$. \square

Démonstration du lemme 4.2.3. Dans le cas particulier où $d = 1$, le Lemme 4.2.6 se réduit à

$$\alpha_i = \frac{1}{|G_a|} \sum_{g \in G_a} \overline{\chi(g)} \in \{0, 1\}. \quad (4.3.5)$$

Cela ne laisse que deux possibilités : soit $\alpha_i = 1$ et tous $\chi(g) = \pi(g)$ sont égaux à 1 pour $g \in G_a$, soit $\alpha_i = 0$ et la somme ci-dessus est égale à 0. \square

Remarquons que dans le cas particulier de la représentation triviale $\pi = \pi^{(0)}$, on est toujours dans le cas $\alpha_i = 1$. Donc toutes les orbites sont actives pour la représentation triviale.

Nous allons maintenant construire les vecteurs de base pour $P_i\mathbb{C}^n$. Soit e^a la base canonique de \mathbb{C}^n associée à $a \in A$, et soit $u^a \in \text{im } P_i$ défini comme

$$u^a = \frac{|G|}{|G_a|} P_i e^a. \quad (4.3.6)$$

Par (4.3.2), ses composantes non nulles sont données par

$$(u^a)_{h(a)} = \frac{|G|}{|G_a|} (P_i)_{ah(a)} = \frac{d}{|G_a|} \sum_{g \in G_a} \overline{\chi(gh)}. \quad (4.3.7)$$

Cette expression est équivalente à (4.2.14). Pour les représentations de dimension 1, cela se réduit à (4.2.7). En effet $\chi(gh) = \pi(gh) = \pi(g)\pi(h)$ en dimension 1, et on peut appliquer le Lemme 4.2.3. Pour la représentation triviale, $(u^a)_{h(a)}$ est identiquement égal à 1.

Afin de calculer les éléments de la matrice L , on introduit le produit scalaire sur \mathbb{C}^n suivant

$$\langle u, v \rangle = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \overline{u_{g(a)}} v_{g(a)} = \frac{|G_a|}{|G|} \sum_{g \in G/G_a} \overline{u_{g(a)}} v_{g(a)}, \quad (4.3.8)$$

où $g \in G/G_a$ est un léger abus de notation pour $gG_a \in G/G_a$ (cela signifie que l'on prend un représentant pour chaque ensemble gG_a). Strictement parlant, seul la restriction de $\langle \cdot, \cdot \rangle$ à l'orbite A est un produit scalaire, puisqu'elle n'est pas définie positive sur tout \mathbb{C}^n .

Lemme 4.3.1. *Le vecteur u^a est normalisé dans le sens où $\langle u^a, u^a \rangle = \alpha_i d$. De plus, pour v^b défini de manière similaire,*

$$\frac{\langle u^a, Lv^b \rangle}{\langle u^a, u^a \rangle} = \frac{d}{\alpha_i |G| |G_b|} \sum_{g \in G} \sum_{g' \in G} \overline{\chi(g)} \chi(g') L_{g(a)g'(b)}. \quad (4.3.9)$$

Démonstration. Nous commençons par le calcul de la norme de u^a :

$$\begin{aligned} \langle u^a, u^a \rangle &= \frac{|G|^2}{|G_a|^2} \langle P_i e^a, P_i e^a \rangle = \frac{|G|^2}{|G_a|^2} \langle e^a, P_i^* P_i e^a \rangle = \frac{|G|^2}{|G_a|^2} \langle e^a, P_i e^a \rangle \\ &= \frac{|G|}{|G_a|} \sum_{g \in G/G_a} \overline{e_{g(a)}^a} (P_i e^a)_{g(a)} = \frac{|G|}{|G_a|} (P_i)_{aa} = \frac{d}{|G_a|} \sum_{h \in G_a} \overline{\chi(h)} = \alpha_i d, \end{aligned} \quad (4.3.10)$$

où nous avons utilisé le fait que P_i est un projecteur hermitien. Avant d'aborder le numérateur de (4.3.9), remarquons que pour une matrice $M \in \mathbb{C}^{n \times n}$ on a

$$\langle e^a, M e^b \rangle = \frac{|G_a|}{|G|} M_{ab}. \quad (4.3.11)$$

De plus,

$$\begin{aligned} \langle u^a, Lv^b \rangle &= \frac{|G|^2}{|G_a| |G_b|} \langle P_i e^a, LP_j e^b \rangle = \frac{|G|^2}{|G_a| |G_b|} \langle e^a, P_i LP_j e^b \rangle \\ &= \frac{|G|}{|G_b|} (P_i LP_j)_{ab}. \end{aligned} \quad (4.3.12)$$

Maintenant on a

$$\begin{aligned} (P_i LP_j)_{ab} &= \sum_{g \in G/G_a} \sum_{g' \in G/G_b} (P_i)_{ag(a)} L_{g(a)g'(b)} (P_j)_{g'(b)b} \\ &= \frac{d^2}{|G|^2} \sum_{g \in G/G_a} \sum_{g' \in G/G_b} \sum_{h \in G_a} \sum_{h' \in G_b} \overline{\chi(gh)} \overline{\chi((g')^{-1}h')} L_{g(a)g'(b)}. \end{aligned} \quad (4.3.13)$$

Comme $\overline{\chi((g')^{-1}h')} = \chi(g'(h')^{-1})$, le résultat vient en remplaçant d'abord $(h')^{-1}$ par h' dans la somme, puis gh par g et $g'h'$ par g' . \square

L'expression (4.3.9) des coefficients de la matrice peut être simplifiée à l'aide de l'identité suivante.

Lemme 4.3.2. *Pour tout $h \in G$,*

$$\frac{d}{|G|} \sum_{g \in G} \overline{\chi(g)} \chi(hg) = \chi(h). \quad (4.3.14)$$

Démonstration. Soit G agissant sur l'ensemble X tel que $G_x = \{\text{Id}\}$ pour tout $x \in X$. Par (4.3.2) on a

$$(P_X)_{x, h(x)} = \frac{d}{|G|} \overline{\chi(h)}. \quad (4.3.15)$$

Cela implique

$$(P_X^2)_{xh(x)} = \sum_{g \in G} (P_X)_{xg(x)} (P_X)_{g(x)h(x)} = \frac{d^2}{|G|^2} \sum_{g \in G} \overline{\chi(g)} \chi(h^{-1}g). \quad (4.3.16)$$

Comme P_X est un projecteur, les deux expressions ci-dessus sont égales. \square

Corollaire 4.3.3. *Les expressions (4.3.9) des coefficients de la matrice se simplifient de la manière suivante*

$$\frac{\langle u^a, Lv^b \rangle}{\langle u^a, u^a \rangle} = \frac{1}{\alpha_i |G_b|} \sum_{g \in G} \chi(g) L_{ag(b)}. \quad (4.3.17)$$

Démonstration. Le résultat vient en posant $g' = gh$ dans (4.3.9), en utilisant $L_{g(a)gh(b)} = L_{ah(b)}$ et en appliquant le lemme précédent. Cela est possible car $\chi(gh) = \text{Tr}(\pi(g)\pi(h)) = \text{Tr}(\pi(h)\pi(g)) = \chi(hg)$. \square

Par l'hypothèse 4.1.9 de non dégénérescence, la somme dans (4.3.17) va être dominée par seulement quelques termes. En utilisant ceci, les coefficients de la matrice L peuvent être écrits comme dans la proposition suivante.

Proposition 4.3.4. *Soit A et B deux orbites distinctes, et supposons que $a \in A$ et $b \in B$ sont tels que $h_{ab} = h^*(A, B)$, l'exposant minimal pour les transitions de A à B . Alors pour tout $h_1, h_2 \in G$,*

$$\frac{\langle u^{h_1(a)}, Lv^{h_2(b)} \rangle}{\langle u^{h_1(a)}, u^{h_1(a)} \rangle} = \frac{L_{ab}}{\alpha_i |G_b|} \sum_{g \in G_a G_b} \chi(h_1 g h_2^{-1}) [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \quad (4.3.18)$$

De plus, les blocs diagonaux peuvent être écrits comme

$$\frac{\langle u^{h_1(a)}, Lu^{h_2(a)} \rangle}{\langle u^{h_1(a)}, u^{h_1(a)} \rangle} = \frac{1}{\alpha_i |G_a|} \sum_{g \in G_a} \left[\chi(h_1 g h_2^{-1}) L_{aa} + \sum_{k \in G/G_a \setminus G_a} \chi(h_1 k g h_2^{-1}) L_{ak(a)} \right]. \quad (4.3.19)$$

Démonstration. Il suit de (4.3.17) que

$$\begin{aligned} \frac{\langle u^{h_1(a)}, Lv^{h_2(b)} \rangle}{\langle u^{h_1(a)}, u^{h_1(a)} \rangle} &= \frac{1}{\alpha_i |G_{h_2(b)}|} \sum_{g \in G} \chi(g) \underbrace{L_{h_1(a)gh_2(b)}}_{=L_{ah_1^{-1}gh_2(b)}} \\ &= \frac{1}{\alpha_i |G_b|} \sum_{k \in G_a G_b} \chi(h_1 k h_2^{-1}) L_{ab} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], \end{aligned} \quad (4.3.20)$$

où on a posé $k = h_1^{-1}gh_2$, et utilisé (4.1.23) et le Lemme 4.1.10. Cela prouve (4.3.18). La relation (4.3.19) vient de (4.3.17) après avoir remplacé $g \in G$ par kg , avec $g \in G_a$ et $k \in G/G_a$, et en mettant à part le terme $k = \text{Id}$. \square

L'expression (4.3.18) est équivalente à (4.2.15) dans la proposition 4.2.7, en prenant compte de la définition (4.2.3) de c_{ij}^* et m_i^* . En particulierisant aux représentations de dimension 1 cela mène à (4.2.8) et (4.2.2).

Il reste donc à déterminer les blocs diagonaux. Pour les représentations de dimension 1, en utilisant $\chi(kg) = \pi(kg) = \pi(k)\pi(g)$ et le lemme 4.2.3 dans (4.3.19) cela montre

$$L_{ii}^{(p)} := \frac{\langle u^a, Lu^a \rangle}{\langle u^a, u^a \rangle} = L_{aa} + \sum_{k \in G/G_a \setminus G_a} \pi(k) L_{ak(a)}. \quad (4.3.21)$$

En soustrayant $L^{(0)}$ de la représentation triviale à $L^{(p)}$ cela prouve (4.2.9). De plus, soit $\mathbf{1}$ le vecteur constant avec toutes ses composantes égales à 1. Comme L est un générateur, on a

$$0 = L\mathbf{1} = \sum_{j=1}^m Lu_j^{(0)} \quad \Rightarrow \quad 0 = \sum_{j=1}^m L_{ij}^{(0)}, \quad (4.3.22)$$

cela prouve (4.2.4).

Finalement soit a^* tel que $h(a, a^*) = \inf_b h(a, b)$. On distingue deux cas :

1. $a^* \notin A$. Alors le terme de droite de (4.3.21) est dominé par le premier terme, et on a $L_{ii}^{(p)} = L_{aa}[1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]$. La somme entre crochets dans (4.3.19) est aussi dominée par le premier terme, cela implique la première ligne dans (4.2.17) et dans (4.2.12).
2. $a^* = k_0(a) \in A$. La relation (4.2.11) implique que $L_{ii}^{(0)}$ est négligeable par rapport à L_{aa^*} , et donc

$$L_{aa} = - \sum_{k \in G/G_a \setminus G_a} L_{ak(a)} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \quad (4.3.23)$$

Ainsi pour les représentations de dimension 1, on obtient de (4.3.21) que

$$L_{ii}^{(p)} := \frac{\langle u^a, Lu^a \rangle}{\langle u^a, u^a \rangle} = - \sum_{k \in G/G_a \setminus G_a} (1 - \pi(k)) L_{ak(a)} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \quad (4.3.24)$$

La somme est dominée par $k = k_0$ et $k = k_0^{-1}$, cela implique que les deux dernières lignes de (4.2.12). Pour les représentations générales, on obtient de (4.3.19) que

$$\frac{\langle u^{h_1(a)}, Lu^{h_2(a)} \rangle}{\langle u^{h_1(a)}, u^{h_1(a)} \rangle} = - \frac{1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})}{\alpha_i |G_a|} \sum_{g \in G_a} \sum_{k \in G/G_a \setminus G_a} [\chi(h_1 g h_2^{-1}) - \chi(h_1 k g h_2^{-1})] L_{ak(a)}, \quad (4.3.25)$$

cela implique la deuxième ligne dans (4.2.17).

4.3.2 Estimation des valeurs propres

Triangularisation par bloc

On considère dans cette sous-section un générateur $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ avec les coefficients de matrice $L_{ij} = e^{-h_{ij}/\varepsilon}$, satisfaisant l'Hypothèse 4.1.3 de l'existence d'une hiérarchie métastable. Dans cette sous-section, on a incorporé le dans l'exposant, c'est à dire, on écrit h_{ij} au lieu de $h_{ij} - \varepsilon \log(c_{ij}/m_i)$ et V_i au lieu de $V_i + \varepsilon \log(m_i)$.

De plus, on suppose la *condition de réversibilité pour les chemins minimaux*

$$V_i + H(i, j) = V_j + H(j, i) + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}) \quad \forall i, j \in \{2, \dots, n\}. \quad (4.3.26)$$

Sous l'Hypothèse de réversibilité (4.1.3), alors (4.3.26) est satisfaite. Cependant (4.3.26) est un peu faible, car cela concerne uniquement les chemins minimaux. On ne suppose pas la réversibilité pour l'état 1, car il nous permettra de couvrir les situations associés aux représentations non triviales. Ainsi la première ligne de L peut être identiquement nulle, faisant de 1 un état absorbant.

Notre but est de construire un changement de variables linéaires transformant L en une matrice triangulaire par blocs. Le changement de variables est obtenu en combinant $n - 1$ transformations

élémentaires jusqu'à la forme triangulaire par blocs. Pour un certain $1 \leq m < n$ donné, on écrit L sous la forme

$$L = \begin{pmatrix} L^{11} & L^{12} \\ L^{21} & A \end{pmatrix}, \quad (4.3.27)$$

avec les blocs $L^{11} \in \mathbb{R}^{(n-m) \times (n-m)}$, $A \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $L^{12} \in \mathbb{R}^{(n-m) \times m}$ et $L^{21} \in \mathbb{R}^{m \times (n-m)}$, et on suppose $\det(A) \neq 0$. On voudrait construire les matrices $S, T \in \mathbb{R}^{n \times n}$ satisfaisant

$$LS = ST \quad (4.3.28)$$

où T est triangulaire par blocs. Plus précisément, on impose que

$$S = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & S^{12} \\ 0 & \mathbf{1} \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad T = \begin{pmatrix} T^{11} & 0 \\ T^{21} & \tilde{A} \end{pmatrix}, \quad (4.3.29)$$

avec les blocs de même dimension que les blocs de L . En injectant (4.3.29) dans (4.3.28) cela mène aux relations

$$\begin{aligned} T^{11} &= L^{11} - S^{12}L^{21}, \\ \tilde{A} &= A + L^{21}S^{12}, \\ T^{21} &= L^{21}, \end{aligned} \quad (4.3.30)$$

et

$$L^{11}S^{12} - S^{12}A - S^{12}L^{21}S^{12} + L^{12} = 0. \quad (4.3.31)$$

Si nous parvenons à prouver que (4.3.31) admet une solution, alors nous aurons montré que L est similaire à la matrice diagonale par blocs T , et les valeurs propres de L sont celles de T^{11} et \tilde{A} . Dans la suite, on munit les matrices de la norme infinie,

$$\|L\| = \sup_{\|x\|_\infty=1} \|Lx\|_\infty, \quad \|x\|_\infty = \sup_i |x_i|. \quad (4.3.32)$$

Proposition 4.3.5. *Si $\|L^{12}A^{-1}\|$ est suffisamment petit, alors (4.3.31) admet une solution S^{12} , telle que $\|S^{12}\| = \mathcal{O}(\|L^{12}A^{-1}\|)$.*

Démonstration. Pour des blocs A, L^{21} fixés, considérons la fonction

$$\begin{aligned} f : \mathbb{R}^{(n-m) \times m} \times \mathbb{R}^{(n-m) \times n} &\rightarrow \mathbb{R}^{(n-m) \times m} \\ (X, (L^{11}, L^{12})) &\mapsto L^{11}XA^{-1} - X - XL^{21}XA^{-1} + L^{12}A^{-1}. \end{aligned} \quad (4.3.33)$$

Alors $f(0,0) = 0$, et la dérivée de Fréchet de f par rapport à X en $(0,0)$ est donnée par $\partial_X f(0,0) = -\text{Id}$. Donc on peut appliquer le théorème des fonctions implicites, et montrer l'existence d'une application $X^* : \mathbb{R}^{(n-m) \times n} \rightarrow \mathbb{R}^{(n-m) \times m}$ telle que $f(X^*, (L^{11}, L^{12})) = 0$ dans un voisinage de $(0,0)$. Alors $S^{12} = X^*(L^{11}, L^{12})$ résout (4.3.31). De plus, $\|S^{12}\| = \mathcal{O}(\|L^{12}A^{-1}\|)$ suit de l'expression de la dérivée de la fonction implicite. \square

Le développement de Taylor à l'ordre 1 de S^{12} est

$$S^{12} = L^{12}A^{-1} + \mathcal{O}\left(\|L^{12}A^{-1}\| [\|L^{11}A^{-1}\| + \|L^{21}L^{12}A^{-2}\|]\right). \quad (4.3.34)$$

On va commencer par l'analyse du développement de Taylor à l'ordre 1 obtenu en utilisant $S_0^{12} = L^{12}A^{-1}$. La matrice à l'ordre 1 qui résulte est

$$T_0 = \begin{pmatrix} T_0^{11} & 0 \\ L^{21} & \tilde{A}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} L^{11} - L^{12}A^{-1}L^{21} & 0 \\ L^{21} & A + L^{21}L^{12}A^{-1} \end{pmatrix} \quad (4.3.35)$$

Lemme 4.3.6. *La matrice T_0^{11} est encore un générateur.*

Démonstration. Le fait que L est un générateur implique que $L^{11}\mathbf{1} + L^{12}\mathbf{1} = 0$ et $L^{21}\mathbf{1} + A\mathbf{1} = 0$, où $\mathbf{1}$ désigne le vecteur constant de taille appropriée. Il s'ensuit que

$$L^{12}A^{-1}L^{21}\mathbf{1} = L^{12}A^{-1}(-A\mathbf{1}) = -L^{12}\mathbf{1} = L^{11}\mathbf{1}, \quad (4.3.36)$$

et donc $T_0^{11}\mathbf{1} = 0$. \square

Nous verrons que T_0^{11} peut être interprété comme un générateur d'un processus de saut Markovien dans lequel les états $i > n - m$ ont été "effacés". Notre stratégie va être de montrer que ce processus réduit à les mêmes hauteurs de communication que le processus original, puis de montrer que les termes d'ordre supérieur dans le développement de Taylor de S^{12} ne changent pas ce fait. On peut donc appliquer la même stratégie au bloc T^{11} , et ainsi de suite jusqu'à ce que la matrice soit triangulaire par blocs avec des blocs de taille m . Les blocs diagonaux de la matrice nous donnent donc les valeurs propres de la matrice L .

Cas de dimension 1

On considère dans ce paragraphe le cas $m = 1$, qui nous permet de couvrir toutes les représentations de dimension 1. Le bloc en bas à droite A de L est donc un nombre réel que nous noterons a ($= L_{nn}$), et on écrira \tilde{a} au lieu de \tilde{A} .

Approximation du développement au premier ordre

Les coefficients de la matrice T_0^{11} sont donnés par (c.f. (4.3.35))

$$T_{ij}^0 = L_{ij} - \frac{1}{a}L_{in}L_{nj}, \quad i, j = 1, \dots, n-1. \quad (4.3.37)$$

L'hypothèse 4.1.3 implique qu'il y a un unique successeur $k = s(n) \in \{1, n-1\}$ tel que $h_{nk} = \min_{j \in \{1, n-1\}} h_{nj}$. Comme L est un générateur, on a $a = -e^{-h_{nk}/\varepsilon}[1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]$, et donc $T_{ij}^0 = e^{-\tilde{h}_{ij}/\varepsilon}$ où

$$\tilde{h}_{ij} = \tilde{h}_{ij}^0 + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}) \quad \text{avec} \quad \tilde{h}_{ij}^0 = h_{ij} \wedge (h_{in} - h_{nk} + h_{nj}). \quad (4.3.38)$$

Le nouvel exposant \tilde{h}_{ij}^0 peut être interprété comme le coût le plus bas pour aller de l'état i à l'état j , en visitant peut être l'état n entre les deux.

On désigne par $\tilde{H}^0(i, j)$ la nouvelle hauteur de communication entre les états $i, j \in \{1, \dots, n-1\}$, définit de la même manière que $H(i, j)$ mais en utilisant \tilde{h}_{ij}^0 au lieu de h_{ij} (les hauteurs de communication en p -pas sont définies de manière similaire). Afin de montrer que les nouvelles hauteurs de communication sont en fait égales aux anciennes, nous commençons par établir une borne inférieure.

Lemme 4.3.7. *Pour tout $i \neq j \in \{1, \dots, n-1\}$,*

$$\tilde{h}_{ij}^0 \geq h_{ij} \wedge h_{inj}, \quad (4.3.39)$$

et on a égalité si $i = k$ ou $j = k$. En conséquence, $\tilde{H}^0(i, j) \geq H(i, j)$ pour ces états i, j .

Démonstration. Rappelons de la Définition 4.1.1 que la hauteur de communication $i \rightarrow n \rightarrow j$ en 2-pas est donnée par $h_{inj} = h_{in} \vee (h_{in} - h_{ni} + h_{nj})$. On considère trois cas :

- Si $i = k$, alors $h_{knj} = h_{kn} - h_{nk} + h_{nj}$ car $h_{nj} > h_{nk}$, et donc $\tilde{h}_{kj}^0 = h_{kj} \wedge h_{knj}$.
- Si $j = k$, alors $h_{ink} = h_{in}$ car $h_{nk} < h_{ni}$, et donc $\tilde{h}_{ik}^0 = h_{ik} \wedge h_{in} = h_{ik} \wedge h_{ink}$.
- Si $i \neq k \neq j$, alors $h_{in} - h_{nk} + h_{nj} > h_{inj}$ car $h_{nk} < h_{ni}, h_{nj}$ et donc (4.3.39) est vérifiée.

La conséquence sur les hauteurs de communication suit en comparant les hauteurs maximales le long des chemins de i à j . \square

Proposition 4.3.8. *Pour tout $i \neq j \in \{1, \dots, n-1\}$ et ε suffisamment petit,*

$$\tilde{H}^0(i, j) = H(i, j) + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}). \quad (4.3.40)$$

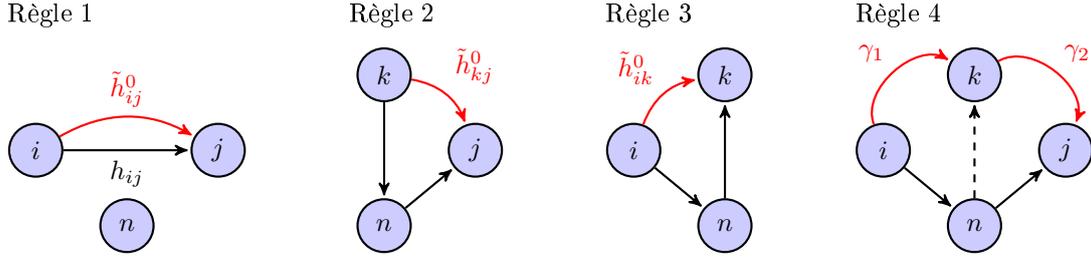


FIGURE 4.5. Règles de remplacement pour les chemins minimaux.

Démonstration. Soit γ un chemin minimal entre deux états i_0 et j_0 . Compte tenu du Lemme 4.3.7, il suffit de construire un chemin $\tilde{\gamma}$ de i_0 à j_0 , qui n'inclut pas n , tel que $\tilde{h}_{\tilde{\gamma}}^0 = h_{\gamma}$. Ce nouveau chemin est obtenu en appliquant la règle de changement suivante (voir la Figure 4.5) :

1. laisser tel quel chaque segment $i \rightarrow j$ avec $i, j \neq k, n$;
2. remplacer chaque segment $k \rightarrow n \rightarrow j$ avec $j \neq k, n$ par $k \rightarrow j$;
3. remplacer chaque segment $i \rightarrow n \rightarrow k$ avec $i \neq k, n$ par $i \rightarrow k$;
4. remplacer chaque segment $i \rightarrow n \rightarrow j$ avec $i, j \neq k, n$ par la concaténation d'un chemin minimal $\gamma_1 : i \rightarrow k$ et d'un chemin minimal $\gamma_2 : k \rightarrow j$. Si l'un de ces chemins contient l'état n , alors appliquer la règle 2 ou 3.

Il est suffisant de montrer que chacune de ces modifications laissent invariant la hauteur de communication locale.

1. Le segment $i \rightarrow j$ avec $i, j \neq k, n$: $h_{ij} \leq h_{inj}$ car le chemin est minimal ; donc soit $h_{ij} \leq h_{in}$ et donc $\tilde{h}_{ij}^0 = h_{ij} \wedge (h_{in} - h_{nk} + h_{nj}) = h_{ij}$ car $h_{nk} < h_{nj}$. Ou $h_{ij} \leq h_{in} - h_{ni} + h_{nj} < h_{in} - h_{nk} + h_{nj}$ et donc on a encore $\tilde{h}_{ij}^0 = h_{ij}$.
2. Le segment $k \rightarrow n \rightarrow j$ avec $j \neq k, n$: Alors $\tilde{h}_{kj}^0 = h_{kj} \wedge (h_{kn} - h_{nk} + h_{nj}) = h_{kn} - h_{nk} + h_{nj}$ car le chemin $k \rightarrow n \rightarrow j$ est minimal, et on a vu dans le lemme précédent que cette quantité est égale à h_{knj} . Donc $\tilde{h}_{kj}^0 = h_{knj}$.
3. Le segment $i \rightarrow n \rightarrow k$ avec $i \neq k, n$: Ici $\tilde{h}_{ik}^0 = h_{ik} \wedge h_{in}$. On a vu dans le lemme précédent que $h_{in} = h_{ink}$, qui doit être plus petite que h_{ik} car le chemin est minimal. On conclut que $\tilde{h}_{ik}^0 = h_{ink}$.
4. Le segment $i \rightarrow n \rightarrow j$ avec $i, j \neq k, n$: Dans ce cas on a $\tilde{h}_{ikj}^0 = h_{inj} + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon})$. En effet,
 - Par la minimalité du chemin, $h_{in} \leq H(i, k) \vee (H(i, k) - H(k, i) + h_{kn})$. L'hypothèse (4.3.26) de réversibilité et la minimalité de γ_1 et $n \rightarrow k$ donnent

$$\begin{aligned} H(i, k) - H(k, i) + h_{kn} &= V_n - V_i + h_{nk} + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}) \\ &= h_{in} - h_{ni} + h_{nk} + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}) \\ &< h_{in} + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}) \end{aligned} \quad (4.3.41)$$

et donc $h_{in} \leq H(i, k) \leq h_{ik}$ pour ε suffisamment petit. Cela implique

$$\tilde{h}_{ik}^0 = h_{ik} \wedge h_{in} = h_{in} . \quad (4.3.42)$$

- La minimalité donne aussi $h_{nj} \leq h_{nk} \vee (h_{nk} - h_{kn} + H(k, j)) = h_{nk} - h_{kn} + H(k, j)$, où nous avons utilisé $h_{nj} > h_{nk}$. Donc $h_{kn} - h_{nk} + h_{nj} \leq H(k, j) \leq h_{kj}$, qui implique

$$\tilde{h}_{kj}^0 = h_{kn} - h_{nk} + h_{nj} . \quad (4.3.43)$$

- Par l'Hypothèse (4.3.26),

$$\begin{aligned} h_{kn} - h_{nk} + h_{ni} &= H(k, i) - H(i, k) + h_{in} + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}) \\ &\leq H(k, i) + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}) \\ &\leq h_{ki} + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}) , \end{aligned} \quad (4.3.44)$$

comme $h_{in} \leq H(i, k)$, et donc

$$\tilde{h}_{ki}^0 = h_{kn} - h_{nk} + h_{ni} + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}). \quad (4.3.45)$$

En combinant (4.3.42), (4.3.43) et (4.3.45), on obtient $\tilde{h}_{ikj}^0 = h_{inj} + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon})$, ce qui conclut la démonstration. \square

Le développement complet

Il reste à étendre les résultats précédents du développement de Taylor au premier ordre S_0^{12} à la solution exacte S^{12} .

Proposition 4.3.9. *Pour ε suffisamment petit, la matrice S^{12} satisfaisant (4.3.31) est donnée par la série convergente*

$$S^{12} = \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{a^{p+1}} (L^{11})^p L^{12} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \quad (4.3.46)$$

Démonstration. Remarquons tout d'abord que par l'Hypothèse 4.1.3, $\|L^{21}A^{-1}\| = |a|^{-1}\|L^{21}\| = \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})$. donc par la Proposition 4.3.5, (4.3.31) admet une solution S^{12} d'ordre $e^{-\theta/\varepsilon}$. Cette solution satisfait

$$S^{12} = \frac{1}{a}L^{12} + \frac{1}{a}L^{11}S^{12} - \frac{S^{12}L^{21}}{a}S^{12}. \quad (4.3.47)$$

Remarquons que $S^{12}L^{21}/a$ est un scalaire d'ordre $e^{-\theta/\varepsilon}$. Il s'ensuit que

$$S^{12} = \frac{1}{a} \left[\mathbb{1} - \frac{1}{a}L^{11} \right]^{-1} L^{12} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], \quad (4.3.48)$$

et en écrivant l'inverse comme une série géométrique nous obtenons ce qu'il fallait démontrer. \square

En injectant (4.3.46) dans (4.3.30), on obtient

$$T^{11} = L^{11} + \sum_{p=0}^{\infty} \frac{1}{a^{p+1}} (L^{11})^p L^{12} L^{21} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \quad (4.3.49)$$

L^{11} et le terme $p = 0$ correspondent au développement de Taylor au premier ordre T_0^{11} . Il s'ensuit que les coefficients de la matrice T^{11} sont de la forme $e^{-\tilde{h}_{ij}/\varepsilon}$ où

$$\tilde{h}_{ij} = \tilde{h}_{ij}^0 \wedge \inf_{\substack{p \geq 1 \\ 1 \leq l_1, \dots, l_p \leq n-1}} \left(h_{il_1} + h_{l_1 l_2} + \dots + h_{l_p n} + h_{nj} - (p+1)h_{nk} \right) + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}). \quad (4.3.50)$$

Afin de contrôler les termes de reste, nous établissons l'estimation suivante.

Lemme 4.3.10. *Pour tout $p \geq 1$, et tout $i, l_1, \dots, l_p \in \{1, \dots, n-1\}$ et $j \in \{1, \dots, n\}$,*

$$h_{il_1} + h_{l_1 l_2} + \dots + h_{l_p j} - ph_{nk} \geq h_{il_1 \dots l_p j} + p\theta, \quad (4.3.51)$$

$$h_{il_1} + h_{l_1 l_2} + \dots + h_{l_p n} + h_{nj} - (p+1)h_{nk} \geq h_{il_1 \dots l_p n j} + p\theta. \quad (4.3.52)$$

Démonstration. Montrons d'abord (4.3.51) pour $p = 1$. Si $h_{il} > h_{il} - h_{li} + h_{lj}$ alors $h_{ilj} = h_{il}$. Cela implique $h_{il} + h_{lj} - h_{nk} = h_{ilj} + (h_{lj} - h_{nk}) \geq h_{ilj} + \theta$, où on a utilisé (4.1.14). Autrement dit $h_{ilj} = h_{il} - h_{li} + h_{lj}$, et donc $h_{il} + h_{lj} - h_{nk} = h_{ilj} + (h_{li} - h_{nk}) \geq h_{ilj} + \theta$. La démonstration peut être facilement étendue par récurrence sur p , en utilisant la Définition (4.1.6) des hauteurs de communication et le fait que $h_{ij} - h_{nk} \geq \theta$ pour $i \in \{1, \dots, n-1\}$.

Pour démontrer la deuxième inégalité (4.3.52) pour $p = 1$, on utilise que si $h_{iln} \geq h_{il} - h_{li} + h_{ln} - h_{nl} + h_{nj}$, alors $h_{ilnj} = h_{iln}$ et donc $h_{il} + h_{ln} + h_{nj} - 2h_{nk} = (h_{il} + h_{ln} - h_{nk}) + (h_{nj} - h_{nk})$ de sorte que la conclusion vient de (4.3.51) et du fait que $h_{nj} \geq h_{nk}$. Sinon on a $h_{ilnj} = h_{il} - h_{li} + h_{ln} - h_{nl} + h_{nj}$ et $h_{il} + h_{ln} + h_{nj} - 2h_{nk} = h_{ilnj} + (h_{li} - h_{nk}) + (h_{nl} - h_{nk})$, qui est plus grand ou égal à $h_{ilnj} + \theta$. La démonstration s'étend alors par récurrence sur p . \square

Corollaire 4.3.11. *Pour tout $i \neq j \in \{0, \dots, n-1\}$,*

$$\tilde{h}_{ij} = \tilde{h}_{ij}^0 \wedge R_{ij} + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}) \quad \text{où } R_{ij} \geq H(i, j) + \theta. \quad (4.3.53)$$

Démonstration. Cela vient directement de (4.3.50), (4.3.52) et de la définition (4.1.7) des hauteurs de communication $H(i, j)$. \square

Corollaire 4.3.12. *Les hauteurs de communication sont préservées à l'ordre dominant en ε , c'est à dire,*

$$\tilde{H}(i, j) = H(i, j) + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon}) \quad \forall i, j \in \{1, \dots, n-1\}. \quad (4.3.54)$$

Démonstration. Le Corollaire 4.3.11 et la Proposition 4.3.8 donne directement $\tilde{H}(i, j) \leq H(i, j) + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon})$ comme $\tilde{h}_{ij} \leq \tilde{h}_{ij}^0 + \mathcal{O}(\varepsilon e^{-\theta/\varepsilon})$ cela implique que les hauteurs maximales rencontrées le long des chemins n'augmentent pas. Pour montrer l'égalité, considérons un chemin optimal $\tilde{\gamma} : i \rightarrow j$. La relation (4.3.53) appliquée a chaque segment de $\tilde{\gamma}$ montre que γ est aussi un chemin optimal pour le générateur original. \square

Remarquons que ce résultat montre en particulier que l'Hypothèse (4.3.37) sur la réversibilité pour les chemins optimaux est satisfaite par la nouvelle hauteur de communication. On peut maintenant établir le résultat principal de cette sous-section, qui caractérise les valeurs propres d'un générateur admettant une hiérarchie métastable.

Théorème 4.3.13 (Valeurs propres d'un générateur métastable). *Soit L un générateur satisfaisant l'Hypothèse 4.1.3 sur l'existence d'une hiérarchie métastable et la condition de réversibilité pour les chemins optimaux (4.3.26). Pour ε suffisamment petit, les valeurs propres de L sont données par $\lambda_1 = 0$ et*

$$\lambda_k = -e^{-H(k, \mathcal{M}_{k-1})/\varepsilon} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], \quad k = 2, \dots, n. \quad (4.3.55)$$

Démonstration. Comme L est un générateur, nécessairement $\lambda_1 = 0$. De plus, L a les mêmes valeurs propres que

$$T = \begin{pmatrix} T^{11} & 0 \\ T^{12} & \tilde{a} \end{pmatrix}, \quad (4.3.56)$$

où $\tilde{a} = a + L^{21}S^{12}$. L'Hypothèse 4.1.3 et le fait que L est un générateur implique que

$$a = e^{-h_{nk}/\varepsilon} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], \quad (4.3.57)$$

avec $h_{nk} = h_{ns(n)} = H(n, \mathcal{M}_{n-1})$. De plus, on a $\|L^{21}\| = \mathcal{O}(a)$ et la Proposition 4.3.5 montre que $\|S^{12}\| = \mathcal{O}(\|L^{12}a^{-1}\|) = \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})$. Donc $\tilde{a} = a(1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon}))$, ce qui prouve (4.3.55) pour $k = n$.

Les valeurs propres restantes $\lambda_2, \dots, \lambda_{n-1}$ sont celles de T^{11} . En ajoutant, si nécessaire, un état cimetièrre, on peut faire que T^{11} soit un générateur (cela veut dire qu'on peut ajouter une première ligne identiquement nulle à T^{11} et une première colonne telle que la somme sur les lignes fassent 0). Le Corollaire 4.3.12 montre que T^{11} admet la même hiérarchie métastable que L , à un terme d'erreur négligeable près. Donc le résultat vient par récurrence sur la taille de L . \square

On a donc prouvé la relation (4.1.15) dans le Théorème 4.1.5, et par extension les assertions correspondantes dans le Théorème 4.2.2 et le Théorème 4.2.5.

Cas de dimension supérieur

On considère maintenant le cas de représentation irréductible de dimension $d \geq 2$. Alors le générateur L a une structure par blocs, avec des blocs dont les dimensions sont des multiples de d . Nous ajoutons un état de cimetièrre pour le système de telle sorte que les sommes des lignes de L soient 0. On associe à L une matrice auxiliaire L_* qui a uniquement un élément $e^{-h^*(A_i, A_j)/\varepsilon}$ pour chaque paire (i, j) d'orbites actives, plus l'état cimetièrre.

En appliquant à L l'algorithme de triangularisation décrit dans la sous-section 4.3.2 cela change les blocs de L à l'ordre dominant selon

$$L_{ij} \mapsto \tilde{L}_{ij} = L_{ij} - L_{in}L_{nn}^{-1}L_{nj}. \quad (4.3.58)$$

L'algorithme induit une transformation de L_* qui est équivalente à l'algorithme de dimension 1 discuté dans la sous-section précédente. Donc on conclut du Théorème 4.3.13 que les hauteurs de communication de L_* sont préservées.

Examinons les deux cas suivants.

- Supposons que $j = s(i)$ est le successeur de i . Alors :
 - si $n \neq s(i)$, alors $\tilde{L}_{ij} = L_{ij}[1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]$, car L_{nj} est au plus d'ordre L_{nn} , et L_{in} est négligeable par rapport à L_{ij} ;
 - si $n = s(i)$, alors soit $j \neq s(n)$, et de nouveau $\tilde{L}_{ij} = L_{ij}[1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]$, car L_{nj} est négligeable par rapport à L_{nn} . Soit $j = s(n)$, et donc $L_{in}L_{nn}^{-1}L_{nj}$ est comparable à L_{ij} . On peut donc conclure que $\tilde{L}_{ij} = L_{ij}[1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]$, à moins que le graphe des successeurs contienne un chemin $i \rightarrow n \rightarrow j$, dans ce cas le terme dominant de L_{ij} est modifié selon (4.3.58).
- Considérons maintenant le cas $j = i$. Par le point précédent, L_{ii} est modifié à l'ordre dominant par l'algorithme de triangularisation si et seulement si le graphe des successeurs contient un cycle $i \rightarrow n \rightarrow i$. Remarquons que dans ce cas, la modification implique les deux matrices L_{in} et L_{ni} . Ces matrices n'ont pas pu être modifiées à l'ordre dominant à l'étape précédente. En effet, L_{in} a été modifié si et seulement s'il existe un $m \succ n$ tel que le graphe des successeurs contient un chemin $i \rightarrow m \rightarrow n$. L'Hypothèse 4.1.9 implique que cela est incompatible avec le fait que le graphe contient $i \rightarrow n \rightarrow i$. Un argument similaire s'applique à L_{ni} .

Il s'ensuit qu'à chaque étape de l'algorithme de triangularisation, les blocs diagonaux L_{ii} sont préservés à l'ordre dominant, à moins que i soit en bas d'un cycle dans le graphe des successeurs. Cela prouve le Théorème 4.2.9.

4.3.3 Espérance de temps d'atteinte

Les résultats attendus impliquant les temps de première atteinte sont tous basés sur la combinaison des formules de Feynman–Kac et de Dynkin. Une version de la formule de Feynman–Kac (voir par exemple [27, Section 1.3]) stipule que pour chaque fonction $f : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{R}$ mesurable et bornée,

$$\mathbb{E}^x[e^{\lambda t} f(X_t)] = (e^{t(L+\lambda \mathbf{1})} f)(x) := \sum_{y \in \mathcal{X}} [e^{t(L+\lambda \mathbf{1})}]_{xy} f(y). \quad (4.3.59)$$

En d'autres termes $u(t, \cdot) = \mathbb{E}^x[e^{\lambda t} f(X_t)]$ satisfait l'équation différentielle $\partial_t u = (L + \lambda \mathbf{1})u$. Ce résultat peut être étendu aux temps d'arrêt, d'une manière similaire à celle de la formule de Dynkin.

Proposition 4.3.14 (“Formule Dynkin–Feynman–Kac”). *Fixons $A \subset \mathcal{X}$ et une fonction $g : A \rightarrow \mathbb{R}$ mesurable et bornée. Alors pour tout $\lambda \in \mathbb{C}$ tel que $\mathbb{E}^x[e^{\lambda \tau_A}] < \infty$, la fonction $h_{A,g}^\lambda : \mathcal{X} \rightarrow \mathbb{C}$ définie par*

$$h_{A,g}^\lambda(x) = \mathbb{E}^x[e^{\lambda \tau_A} g(X_{\tau_A})] \quad (4.3.60)$$

satisfait le problème au bord

$$\begin{aligned} (Lh)(x) &= -\lambda h(x) & x \in A^c, \\ h(x) &= g(x) & x \in A. \end{aligned} \quad (4.3.61)$$

Inversement, si h satisfait le problème au bord (4.3.61) et $\mathbb{E}^x[e^{\lambda \tau_A}] < \infty$, alors $h = h_{A,g}^\lambda$.

Démonstration. Par la propriété de Markov, pour tout $x \in A^c$ et $t, s \geq 0$,

$$\mathbb{E}^x[\mathbb{E}^{X_t}[1_{\tau_A \geq s} g(X_{\tau_A})]] = \mathbb{E}^x[\mathbb{E}^x[1_{\tau_A \geq t+s} g(X_{\tau_A}) \mid \mathcal{F}_t]] = \mathbb{E}^x[1_{\tau_A \geq t+s} g(X_{\tau_A})]. \quad (4.3.62)$$

En intégrant par rapport à $\lambda e^{\lambda s}$ de 0 à ∞ cela nous donne

$$\begin{aligned} \mathbb{E}^x[\mathbb{E}^{X_t}[e^{\lambda \tau_A} g(X_{\tau_A})]] &= \mathbb{E}^x[1_{\tau_A \geq t} e^{\lambda(\tau_A - t)} g(X_{\tau_A})] + \mathbb{E}^x[1_{\tau_A < t} g(X_{\tau_A})] \\ &= e^{-\lambda t} \mathbb{E}^x[e^{\lambda \tau_A} g(X_{\tau_A})] + \mathbb{E}^x[1_{\tau_A < t} (1 - e^{\lambda(\tau_A - t)}) g(X_{\tau_A})], \end{aligned} \quad (4.3.63)$$

et donc

$$\mathbb{E}^x[h_{A,g}^\lambda(X_t)] = e^{-\lambda t} h_{A,g}^\lambda(x) + \mathcal{O}(t^2). \quad (4.3.64)$$

Par définition d'un générateur, il s'ensuit que

$$(Lh_{A,g}^\lambda)(x) = \frac{d}{dt} \mathbb{E}^x[h_{A,g}^\lambda(X_t)] \Big|_{t=0} = -\lambda h_{A,g}^\lambda(x). \quad (4.3.65)$$

Si $x \in A$, alors $\tau_A = 0$ donc clairement $h_{A,g}^\lambda(x) = g(x)$. Cela prouve que $h_{A,g}^\lambda(x)$ satisfait (4.3.61). Pour prouver l'inverse, soit $h(x)$ satisfaisant (4.3.61). Par la formule de Feynman–Kac (4.3.59),

$$\mathbb{E}^x[e^{\lambda t} h(X_t)] = h(x) + \mathbb{E}^x \left[\int_0^t e^{\lambda s} [(L + \lambda \mathbf{1})h](X_s) ds \right]. \quad (4.3.66)$$

En évaluant cela en $t \wedge \tau_A$ et en prenant la limite $t \rightarrow \infty$, qui est justifiée par le théorème de convergence dominée, on obtient

$$\mathbb{E}^x[e^{\lambda \tau_A} g(X_{\tau_A})] = h(x) + \mathbb{E}^x \left[\int_0^{\tau_A} e^{\lambda s} \underbrace{[(L + \lambda \mathbf{1})h](X_s)}_{=0} ds \right] = h(x), \quad (4.3.67)$$

ce qu'il fallait démontrer. \square

En particulier, pour $g(x) = 1_A(x)$, on voit que $h_A^\lambda(x) = \mathbb{E}^x[e^{\lambda \tau_A}]$ satisfait l'équation

$$\begin{aligned} (Lh_A^\lambda)(x) &= -\lambda h_A^\lambda(x) & x \in A^c, \\ h_A^\lambda(x) &= 1 & x \in A. \end{aligned} \quad (4.3.68)$$

Remarquons que $h_A^0(x) = 1$ pour tout $x \in \mathcal{X}$. Considérons maintenant la fonction

$$w_A(x) = \frac{d}{d\lambda} h_A^\lambda(x) \Big|_{\lambda=0} = \mathbb{E}^x[\tau_A]. \quad (4.3.69)$$

En évaluant la dérivée de (4.3.68) en $\lambda = 0$, et en utilisant le fait que $w_A(x) = 0$ pour tout $x \in A$, on obtient la relation

$$\sum_{y \in A^c} L_{xy} w_A(y) = -1. \quad (4.3.70)$$

Si on pose $B = A^c$ et écrit L comme

$$L = \begin{pmatrix} L_{AA} & L_{AB} \\ L_{BA} & L_{BB} \end{pmatrix}, \quad (4.3.71)$$

alors (4.3.70) on a

$$w_A = -L_{BB}^{-1} \mathbf{1}. \quad (4.3.72)$$

Proposition 4.3.15 (Espérance de temps d'atteinte). *Si L satisfait les hypothèses du Théorème 4.1.5 et $A = \mathcal{M}_k = \{1, \dots, k\}$ avec $k \geq 1$, alors*

$$\mathbb{E}^x[\tau_A] = \frac{1}{|\lambda_{k+1}|} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})] \quad (4.3.73)$$

pour tout $x \in A^c$.

Démonstration. La démonstration se fait par récurrence sur la taille $m = n - k$ de L_{BB} . Le résultat est trivialement vrai pour $m = 1$, comme le coefficient en bas à droite de la matrice L est égale à la valeur propre λ_n , à un terme d'erreur multiplicatif près $1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})$. Supposons alors $m > 1$ et écrivons

$$L_{BB} = \begin{pmatrix} L^{11} & L^{12} \\ L^{21} & a \end{pmatrix}, \quad (4.3.74)$$

avec les blocs $L^{11} \in \mathbb{R}^{(m-1) \times (m-1)}$, $L^{12} \in \mathbb{R}^{(m-1) \times 1}$, $L^{21} \in \mathbb{R}^{1 \times (m-1)}$ et $a \in \mathbb{R}$. En utilisant (4.3.28) et (4.3.29), on voit que

$$\begin{aligned} L_{BB}^{-1} \mathbf{1} &= ST^{-1}S^{-1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & S_{12} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (T^{11})^{-1} & 0 \\ -\tilde{a}^{-1}L^{21}(T^{11})^{-1} & \tilde{a}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{1} & -S_{12} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{1} \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{1} & S_{12} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (T^{11})^{-1} & 0 \\ -\tilde{a}^{-1}L^{21}(T^{11})^{-1} & \tilde{a}^{-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{1} - S^{12} \\ 1 \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} \mathbf{1} & S_{12} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} (T^{11})^{-1}[\mathbf{1} + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})] \\ \tilde{a}^{-1}[\mathbf{1} - L^{21}(T^{11})^{-1}\mathbf{1}(1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon}))] \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.3.75)$$

Par hypothèse de récurrence, on a que

$$(T^{11})^{-1}\mathbf{1} = \frac{1}{|\lambda_{k+1}|} \mathbf{1} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], \quad (4.3.76)$$

cela implique

$$L^{21}(T^{11})^{-1}\mathbf{1} = \frac{L^{21}\mathbf{1}}{|\lambda_{k+1}|} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})] = \frac{|\lambda_n|}{|\lambda_{k+1}|} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \quad (4.3.77)$$

En injectant cela dans (4.3.75) et en utilisant le fait que $|\lambda_{k+1}|/|\lambda_n| = \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})$ on obtient

$$L_{BB}^{-1} \mathbf{1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & S_{12} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\lambda_{k+1}|^{-1} \mathbf{1} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})] \\ |\lambda_{k+1}|^{-1} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})] \end{pmatrix} = \frac{1}{|\lambda_{k+1}|} \mathbf{1} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], \quad (4.3.78)$$

ce qui prouve le résultat. \square

Ceci termine la preuve du Théorème 4.1.5, et donc aussi le Théorème 4.2.2 et le Théorème 4.2.5.

4.4 Retour sur le cas de la dimension 4

Comme nous l'avions montré dans la section 2.4, pour $0 \leq \gamma < 2/5$ le système admet 6 minima locaux, connectés par 12 selles d'indice 1. Le potentiel (2.0.1) est invariant sous le groupe de symétrie $G = D_4 \times \mathbb{Z}_2 = \langle r, s, c \rangle$, qui est de cardinal 16 et est engendré par la rotation $r : (x_1, x_2, x_3, x_4) \mapsto (x_2, x_3, x_4, x_1)$, la symétrie $s : (x_1, x_2, x_3, x_4) \mapsto (x_4, x_3, x_2, x_1)$, et le changement de signe $c : x \mapsto -x$. Les minima locaux forment deux orbites

$$\begin{aligned} A_1 &= \{(+, +, -, -), (+, -, -, +), (-, -, +, +), (-, +, +, -)\} \\ &= \{a, r(a), r^2(a), r^3(a)\} \\ A_2 &= \{(+, -, +, -), (-, +, -, +)\} = \{b, r(b)\}, \end{aligned} \quad (4.4.1)$$

où on a noté $\pm = \pm 1 + \mathcal{O}(\gamma)$ et où on a choisi $a = (+, +, -, -)$ et $b = (+, -, +, -)$ comme représentant. Les stabilisateurs associés sont

$$\begin{aligned} G_a &= \{\text{Id}, r^2s, sc, r^2c\} \\ G_b &= \{\text{Id}, rs, r^2, r^3s, sc, rc, r^2sc, r^3c\}. \end{aligned} \quad (4.4.2)$$

Nous avons vu aussi dans la section 2.4 que le graphe des liaisons forme un octaèdre comme rappelé dans la Figure 4.6 avec en plus, dans cette même figure, le graphe des liaisons en terme d'orbite. Remarquons en particulier que (4.1.25) est satisfaite. En effet, $|G_a \cap G_b| = 2$, et chaque état dans A_1 a $|G_a|/|G_a \cap G_b| = 2$ états de A_2 avec lesquels il communique, alors que chaque état dans A_2 a $|G_b|/|G_a \cap G_b| = 4$ états de A_1 avec lesquels il communique.

L'analyse du potentiel (2.0.1) montre que les transitions de probabilités sont de la forme

$$L_{ab} = \frac{c_{ab}}{m_a} e^{-h_{ab}/\varepsilon}, \quad L_{ba} = \frac{c_{ab}}{m_b} e^{-h_{ba}/\varepsilon}, \quad L_{aa'} = \frac{c_{aa'}}{m_a} e^{-h_{aa'}/\varepsilon}, \quad (4.4.3)$$

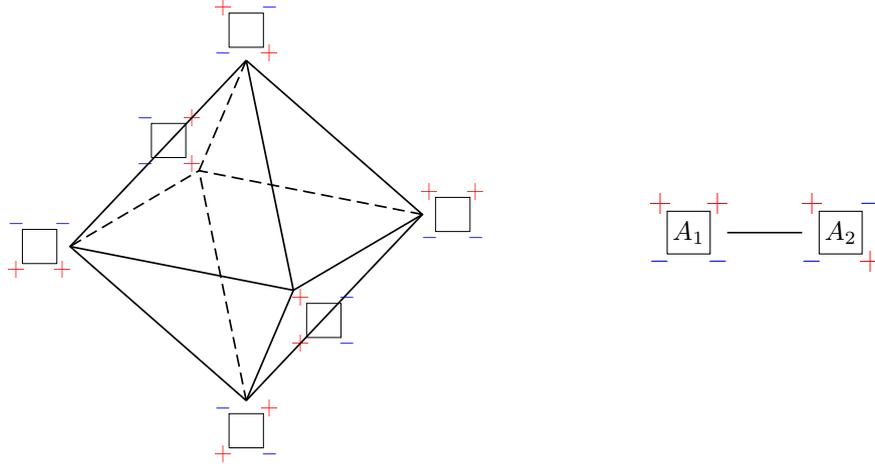


FIGURE 4.6. Le graphe des liaisons $\mathcal{G} = (\mathcal{X}, E)$ pour le cas $N = 4$ a 6 sommets et 12 arêtes, formant un octaèdre. Le graphe des liaisons en terme d'orbites a 2 sommets et 1 arête.

où les exposants satisfont

$$h_{ba} < h_{aa'} < h_{ab} \quad (4.4.4)$$

quand $0 < \gamma < 2/5$. On pose $\theta = (h_{aa'} - h_{ba}) \wedge (h_{ab} - h_{aa'})$. Le générateur L est de la forme

$$L = \begin{pmatrix} L^{11} & L^{12} \\ L^{21} & L^{22} \end{pmatrix}, \quad (4.4.5)$$

avec les blocs

$$L^{11} = \begin{pmatrix} -2L_{aa'} - 2L_{ab} & L_{aa'} & 0 & L_{aa'} \\ L_{aa'} & -2L_{aa'} - 2L_{ab} & L_{aa'} & 0 \\ 0 & L_{aa'} & -2L_{aa'} - 2L_{ab} & L_{aa'} \\ L_{aa'} & 0 & L_{aa'} & -2L_{aa'} - 2L_{ab} \end{pmatrix}, \quad (4.4.6)$$

$$L^{12} = \begin{pmatrix} L_{ab} & L_{ab} \\ L_{ab} & L_{ab} \\ L_{ab} & L_{ab} \\ L_{ab} & L_{ab} \end{pmatrix}, \quad L^{21} = \begin{pmatrix} L_{ba} & L_{ba} & L_{ba} & L_{ba} \\ L_{ba} & L_{ba} & L_{ba} & L_{ba} \end{pmatrix}, \quad L^{22} = \begin{pmatrix} -4L_{ba} & 0 \\ 0 & -4L_{ba} \end{pmatrix}.$$

On peut maintenant appliquer les résultats de la section 4.2. Nous connaissons grâce à l'exemple 4.1.11 toutes les représentations irréductibles de G . Il a 8 représentations irréductibles de dimension 1, données par

$$\pi_{\rho\sigma\tau}(r^i s^j c^k) = \rho^i \sigma^j \tau^k, \quad \rho, \sigma, \tau = \pm 1, \quad (4.4.7)$$

et 2 représentations irréductibles de dimension 2, que l'on notera $\pi_{1,\pm}$, avec pour caractères

$$\chi_{1,\pm}(r^i s^j c^k) = 2 \cos(i\pi/2) \delta_{j0} (\pm 1)^k. \quad (4.4.8)$$

En appliquant le Lemme 4.2.3 et le Lemme 4.2.6, on obtient la table 4.1 des orbites actives et inactives.

La table 4.1 montre que la représentation de la permutation π induite par G sur $\mathcal{X} = A_1 \cup A_2$ admet la décomposition

$$\pi = 2\pi_{+++} \oplus \pi_{-++} \oplus \pi_{---} \oplus \pi_{1,-}. \quad (4.4.9)$$

On peut maintenant déterminer les valeurs associées à chaque représentation irréductible :

- La représentation triviale π_{+++} : Le sous-espace associé est de dimension 2, et est engendré par les vecteurs ${}^t(1, 1, 1, 1, 0, 0)$ et ${}^t(0, 0, 0, 0, 1, 1)$. La matrice dans cette base est donnée par

$$L^{(0)} = \begin{pmatrix} -2L_{ab} & 2L_{ab} \\ 4L_{ba} & -4L_{ba} \end{pmatrix}, \quad (4.4.10)$$

	A_1	A_2	αd
π_{+++}	1	1	2
π_{++-}	0	0	0
π_{+-+}	0	0	0
π_{+--}	0	0	0
π_{-++}	1	0	1
π_{-+-}	0	0	0
π_{--+}	0	0	0
π_{---}	0	1	1
$\pi_{1,+}$	0	0	0
$\pi_{1,-}$	2	0	2
$ A $	4	2	6

TABLE 4.1. Orbites actives et inactives et le nombre des valeurs propres pour les différentes représentations irréductibles dans le cas $N = 4$.

cela peut être vérifié par un calcul élémentaire, et est compatible avec la Proposition 4.2.1. Les valeurs propres de $L^{(0)}$ sont 0 et $-4L_{ba} - 2L_{ab}$, qui sont aussi compatibles avec le Théorème 4.2.2 (donnant le comportement à l'ordre dominant $-4L_{ba}[1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]$). En particulier, on conclut que si μ est la distribution uniforme sur A_2 , alors on a le coefficient de Kramers

$$\mathbb{E}^\mu[\tau_{A_1}] = \frac{1}{4} \frac{m_b}{c_{ab}} e^{h_{ba}/\varepsilon} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \quad (4.4.11)$$

Remarquons le préfacteur $1/4$, qui est du à la symétrie.

- La représentation π_{-++} : De l'équation (4.2.7) on voit que le sous-espace associé est engendré par le vecteur ${}^t(1, -1, 1, -1, 0, 0)$. Un calcul direct nous montre que la valeur propre associée est $-4L_{aa'} - 2L_{ab}$, qui est aussi compatible avec (4.2.12), où on doit appliquer le deuxième cas, et utiliser le fait que $\pi_{-++}(r) = -1$.
- La représentation π_{---} : De l'équation (4.2.7) on voit que le sous-espace associé est engendré par le vecteur ${}^t(0, 0, 0, 0, 1, -1)$. Un calcul direct nous montre que la valeur propre associée est $-4L_{ba}$, et le même résultat est obtenu en appliquant (4.2.12) (premier cas).
- La représentation $\pi_{1,-}$: De l'équation (4.2.14) on voit que le sous-espace associé est engendré par les vecteurs ${}^t(2, 0, -2, 0, 0, 0)$ et ${}^t(0, 2, 0, -2, 0, 0)$. La matrice associée est

$$L^{1,-} = \begin{pmatrix} -2L_{aa'} - 2L_{ab} & 0 \\ 0 & -2L_{aa'} - 2L_{ab} \end{pmatrix} \quad (4.4.12)$$

et donc $-2L_{aa'} - 2L_{ab}$ est une valeur propre de multiplicité 2. Le comportement à l'ordre dominant $-2L_{aa'}[1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]$ est aussi obtenu en utilisant (4.2.17) avec $a^* = r(a)$ et (4.2.19) (premier cas), qui montre que $M = 2\mathbf{1}$.

En résumé, à l'ordre dominant les valeurs propres du générateur sont données par

$$0, -2L_{aa'}, -2L_{aa'}, -4L_{aa'}, -4L_{ba}, -4L_{ba}. \quad (4.4.13)$$

Ils forment trois groupes partageant un même exposant, avec potentiellement des préfacteurs différents. Remarquons en particulier que le trou spectral est donné par $2L_{aa'}$, qui est plus petit que dans le cas d'un double puits asymétrique, qui serait L_{ba} . Cela est dû au fait que le processus le plus lent dans le système est la dynamique interne de l'orbite A_1 .

4.5 Retour sur le cas de la dimension 8

Nous avons vu dans la section 3.3 la classification des points critiques, il y a 182 minima locaux et 560 selles d'indice 1. Ainsi que le graphe des liaisons était difficilement réalisable de manière simple. Maintenant, avec tout ce que nous avons introduit dans ce chapitre nous allons

pouvoir en faire un simple. Tout d'abord il nous faut les orbites différentes de ce système. Les 182 minima locaux forment 12 orbites de cardinaux variés entre 2 et 32 (dépendant des cardinaux des stabilisateurs associés) ce qui donne la table 4.2.

A	$ A $	a	G_a
A_1	8	$(+, +, +, +, -, -, -, -)$	$\{\text{Id}, r^4 s, r^4 c, sc\}$
A_2	4	$(+, +, -, -, +, +, -, -)$	$\{\text{Id}, r^2 s, r^4, r^6 s, sc, r^2 c, r^4 sc, r^6 c\}$
A_3	16	$(+, +, +, -, -, +, -, -)$	$\{\text{Id}, r^3 s\}$
A_4	16	$(+, -, -, -, +, +, +, -)$	$\{\text{Id}, sc\}$
A_5	8	$(+, -, -, +, -, +, +, -)$	$\{\text{Id}, r^4 s, r^4 c, sc\}$
A_6	16	$(+, +, -, +, -, +, -, -)$	$\{\text{Id}, sc\}$
A_7	2	$(+, -, +, -, +, -, +, -)$	$\{\text{Id}, rs, r^2, r^3 s, r^4, r^5 s, r^6, r^7 s, sc, rc, r^2 sc, r^3 c, r^4 sc, r^5 c, r^6 sc, r^7 c\}$
A_8	32	$(\alpha, \alpha, \beta, \beta, \beta, \alpha, \beta, \beta)$	$\{\text{Id}\}$
A_9	16	$(\alpha, \alpha, \alpha, \beta, \beta, \beta, \beta, \beta)$	$\{\text{Id}, r^3 s\}$
A_{10}	16	$(\beta, \alpha, \beta, \beta, \alpha, \beta, \alpha, \beta)$	$\{\text{Id}, r^3 s\}$
A_{11}	16	$(\beta, \alpha, \beta, \alpha, \beta, \beta, \beta, \alpha)$	$\{\text{Id}, r^3 s\}$
A_{12}	32	$(\alpha, \beta, \alpha, \alpha, \beta, \beta, \beta, \beta)$	$\{\text{Id}\}$

TABLE 4.2. Les orbites A_i pour le cas $N = 8$ avec leurs cardinaux, un représentant a et son stabilisateur G_a . Les symboles \pm signifient $\pm 1 + \mathcal{O}(\gamma)$, tandis que $\alpha = \pm 5/\sqrt{19} + \mathcal{O}(\gamma)$ et $\beta = \mp 3/\sqrt{19} + \mathcal{O}(\gamma)$. Les stabilisateurs d'autres éléments $a' = g(a)$ de n'importe quelle orbite sont obtenus par conjugaison par g .

Nous avons réussi à établir la hiérarchie métastable en calculant les hauteurs de communication à l'ordre 2 en γ grâce à l'aide d'un logiciel de calcul (Maple).

Nous avons vu aussi par la Proposition 3.2.1 que l'ensemble des chemins possibles sont de la forme

$$(0, 4, 4) \leftrightarrow (1, 3, 4) \leftrightarrow (0, 3, 5),$$

et que les minima locaux sont connectés selon les règles suivantes

$$\begin{aligned}
 \beta &\leftrightarrow +(1 \text{ élément}) & -\beta &\leftrightarrow -(1 \text{ élément}) \\
 \alpha &\leftrightarrow +(3 \text{ éléments}) & -\alpha &\leftrightarrow -(3 \text{ éléments}) \\
 \beta &\leftrightarrow -(4 \text{ éléments}) & -\beta &\leftrightarrow +(4 \text{ éléments}),
 \end{aligned} \tag{4.5.1}$$

signifiant que chaque α (respectivement $-\alpha$) et un des β (respectivement $-\beta$) sont connectés à des $+$ (respectivement $-$) et les quatre autres β (respectivement $-\beta$) sont connectés à des $-$ (respectivement $+$).

Nous pouvons donc enfin donner un graphe des liaisons pour ce cas à l'aide des orbites, voir la figure 4.7.

Dans notre cas $N = 8$, le potentiel est invariant sous le groupe $G = D_8 \times \mathbb{Z}_2$, qui est de cardinal 32. Nous connaissons grâce à l'exemple 4.1.11 toutes les représentations irréductibles de G . Il a 8 représentations irréductibles de dimension 1, données par

$$\pi_{\rho\sigma\tau}(r^i s^j c^k) = \rho^i \sigma^j \tau^k, \quad \rho, \sigma, \tau = \pm 1, \tag{4.5.2}$$

En plus, il a 6 représentations irréductibles de dimension 2 déduites de celles de D_8 , cf. (4.1.30). Nous les noterons $\pi_{l,\pm}$, $l \in \{1, 2, 3\}$, et leurs caractères satisfaisant (see (4.1.31))

$$\chi_{l,\pm}(r^i s^j c^k) = 2 \cos(il\pi/4) \delta_{j0} (\pm 1)^k. \tag{4.5.3}$$

En appliquant le Lemme 4.2.3 et le Lemme 4.2.6, on obtient la table 4.3 des orbites actives et inactives.

Il est maintenant possible de déterminer les valeurs propres associées à chaque représentation irréductible. La représentation triviale π_{+++} donnera 12 valeurs propres, qui sont données par le

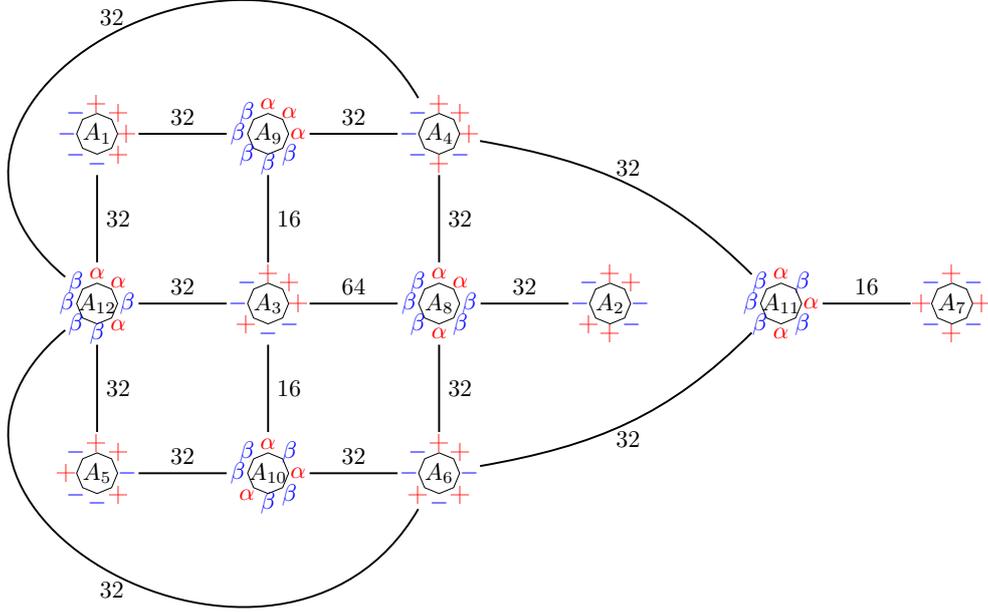


FIGURE 4.7. Graphe des liaisons avec les orbites pour le cas $N = 8$. Chaque sommet affiche un représentant particulier de l'orbite. Les chiffres à côté des arêtes indiquent le nombre total de connexions entre les éléments des orbites. Notez qu'il y a une sorte d'effet d'hystérésis, dans le sens quand faisant une boucle dans le graphe, en suivant les règles de connexion, on ne finit pas nécessairement avec le même représentant de l'orbite.

Théorème 4.2.2. La seule différence avec les coefficients de Kramers du cas asymétrique est un facteur supplémentaire de la forme $|G_c|/|G_a \cap G_b|$, où (a, b) est la plus haute arête d'un chemin optimal de A_k à \mathcal{M}_{k-1} , et $c \in A_k$. Par exemple, le chemin optimal de A_7 à \mathcal{M}_6 est $A_7 \rightarrow A_{11} \rightarrow A_4$, et sa plus haute arête est $A_7 \rightarrow A_{11}$. Nous obtenons ainsi

$$\lambda_7^{(0)} = 8 \frac{c_{a_7 a_{11}}}{m_{a_7}} e^{-H(A_7, A_{11})/\varepsilon} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})] \quad (4.5.4)$$

où $a_7 \in A_7$ et $a_{11} \in A_{11}$, car $|G_{a_7}| = 16$ et $|G_{a_7} \cap G_{a_{11}}| = 2$ (cf. la table 4.2).

Les valeurs propres associées aux autres représentations irréductibles de dimension 1 peuvent être déduites de la hiérarchie métastable de l'ensemble d'orbites actives correspondant. Par exemple, la Figure 4.8 montre le graphe obtenu pour la représentation π_{-++} , et elle nous donnera 7 valeurs propres. Une différence importante du cas précédent provient du fait que certaines hauteurs de communication pertinentes pour les valeurs propres sont associées à des transitions vers l'état cimetière. En particulier, A_1 n'est plus le premier de la hiérarchie métastable (c'est l'état cimetière), et donc il y aura une valeur propre d'ordre $e^{-H(A_1, A_9)/\varepsilon}$, car A_9 est le successeur de A_1 , de la forme

$$\lambda_1^{(-++)} = -4 \frac{c_{a_1 a_9}}{m_{a_1}} e^{-H(A_1, A_9)/\varepsilon} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \quad (4.5.5)$$

Les valeurs propres associées aux représentations irréductibles de dimension 2 sont données par le Théorème 4.2.9. Le graphe des successeurs est présenté dans la Figure 4.9. Observons que A_1 est en bas du cycle contenant A_1 et A_9 . Par exemple, pour la représentation $\pi_{1,-}$, en appliquant la

	A_1	A_2	A_3	A_4	A_5	A_6	A_7	A_8	A_9	A_{10}	A_{11}	A_{12}	αd
π_{+++}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	12
π_{++-}	0	0	1	0	0	0	0	1	1	1	1	1	6
π_{+-+}	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	2
π_{+--}	0	0	0	1	0	1	0	1	0	0	0	1	4
π_{-++}	1	1	0	1	1	1	0	1	0	0	0	1	7
π_{-+-}	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	2
π_{--+}	0	0	1	0	0	0	0	1	1	1	1	1	6
π_{---}	0	0	1	1	0	1	1	1	1	1	1	1	9
$\pi_{1,+}$	0	0	2	2	0	2	0	4	2	2	2	4	20
$\pi_{1,-}$	2	0	2	2	2	2	0	4	2	2	2	4	24
$\pi_{2,+}$	2	0	2	2	2	2	0	4	2	2	2	4	24
$\pi_{2,-}$	0	2	2	2	0	2	0	4	2	2	2	4	22
$\pi_{3,+}$	0	0	2	2	0	2	0	4	2	2	2	4	20
$\pi_{3,-}$	2	0	2	2	2	2	0	4	2	2	2	4	24
$ A $	8	4	16	16	8	16	2	32	16	16	16	32	182

TABLE 4.3. Orbites actives et inactives et le nombre de valeurs propres pour les différentes représentations irréductibles quand $N = 8$. Il y a 182 valeurs propres au total, 48 associées aux représentations irréductibles de dimension 1, et 134 associées aux représentations irréductibles de dimension 2.

Proposition 4.2.7 avec pour choix de base $(u_i^a, u_i^{a'})$ avec $a' = r^2(a)$ pour chaque orbite, on obtient

$$\begin{aligned}
 L_{11}^{(1,-)} &= L_{11}^{(0)} \mathbf{1}[1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], & L_{11}^{(0)} &= -4 \frac{c_{a_1 a_9}}{m_{a_1}} e^{-H(A_1, A_9)/\varepsilon}, \\
 L_{19}^{(1,-)} &= L_{11}^{(0)} M_{19} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], \\
 L_{91}^{(1,-)} &= L_{99}^{(0)} M_{91} [1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})], & L_{99}^{(0)} &= -2 \frac{c_{a_9 a_1}}{m_{a_9}} e^{-H(A_9, A_1)/\varepsilon}, \\
 L_{99}^{(1,-)} &= L_{99}^{(0)} \mathbf{1}[1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})],
 \end{aligned} \tag{4.5.6}$$

où

$$M_{19} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 + \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ -\sqrt{2} & 2 + \sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad M_{91} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 2 + \sqrt{2} & -\sqrt{2} \\ \sqrt{2} & 2 + \sqrt{2} \end{pmatrix}. \tag{4.5.7}$$

Donc par le Théorème 4.2.9, les valeurs propres associées à A_1 sont celles de la matrice

$$L_{11}^{(1,-)} - L_{19}^{(1,-)} (L_{99}^{(1,-)})^{-1} L_{91}^{(1,-)} = -(2 - \sqrt{2}) \frac{c_{a_1 a_9}}{m_{a_1}} e^{-H(A_1, A_9)/\varepsilon} \mathbf{1}[1 + \mathcal{O}(e^{-\theta/\varepsilon})]. \tag{4.5.8}$$

On obtient donc une valeur propre double donnée par le coefficient de Kramers avec un facteur supplémentaire $(2 - \sqrt{2})$. Les valeurs propres correspondantes à l'orbite A_1 pour les autres représentations irréductibles de dimension 2 ont la même forme. Comme $2 - \sqrt{2} < 4$, 4.5.8 nous donne aussi le trou spectral du système. Il est plus petit que le trou spectral du système restreint purement à la distribution symétrique, qui est décrit par la représentation triviale et est d'ordre $e^{-H(A_2, A_1)/\varepsilon}$.

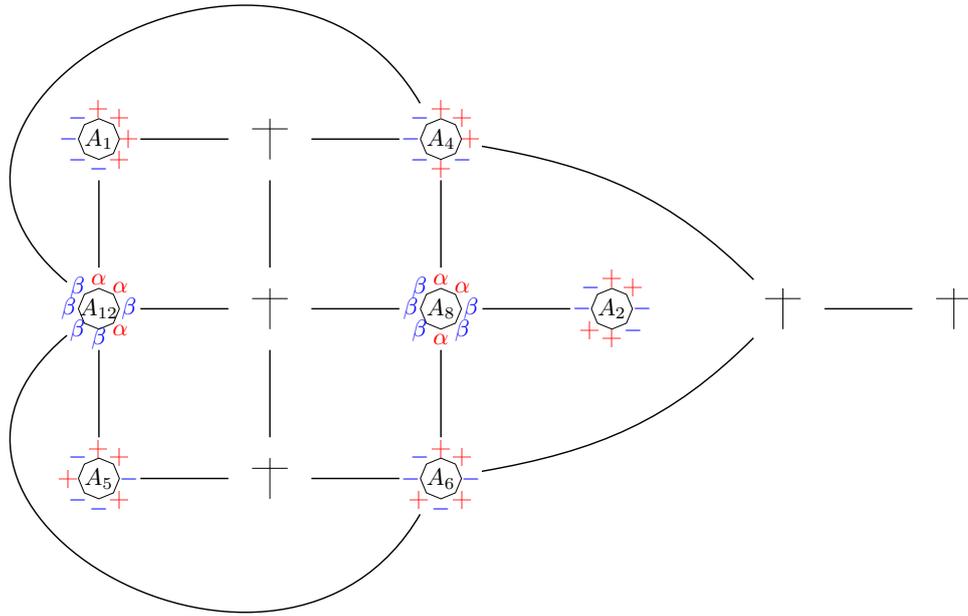


FIGURE 4.8. Graphe des liaisons pour le cas $N = 8$ associé à la représentation π_{-++} .

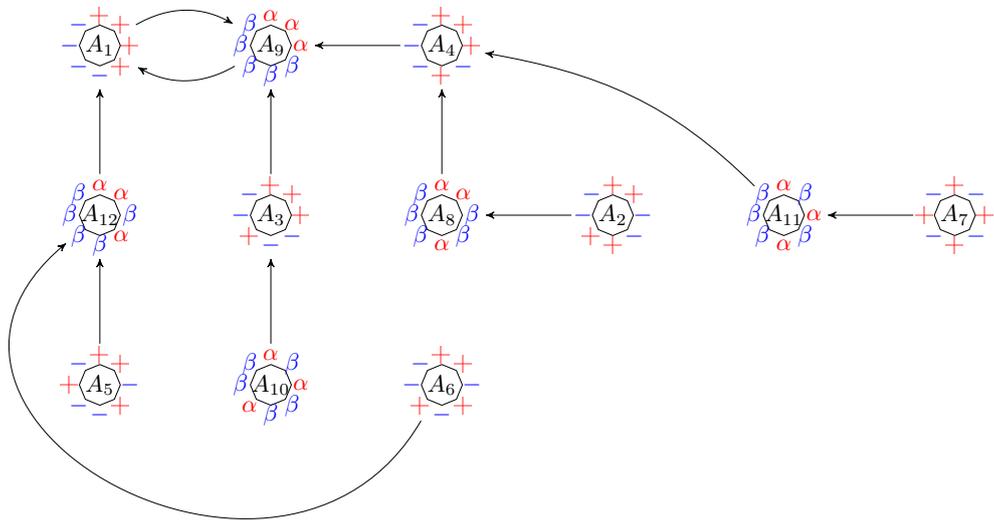


FIGURE 4.9. Le graphe des successeur pour le cas $N = 8$.

Chapitre 5

Processus de diffusion

Maintenant que nous avons étudié de manière générale les processus de saut Markoviens, nous allons nous intéresser aux processus de diffusion et voir que le comportement à long terme des processus de diffusion est similaire à celui des processus de saut Markoviens.

Nous allons considérer le processus de diffusion $X_\epsilon(t)$, avec $\epsilon > 0$, solution de l'équation différentielle

$$dX_\epsilon(t) = -\nabla V(X_\epsilon(t))dt + \sqrt{2\epsilon}dW(t), \quad (5.0.1)$$

sur un domaine régulier $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, où le gradient ∇V est généré par une fonction potentielle V suffisamment régulière et $dW(t)$ est le mouvement Brownien standard de dimension d . Nous nous intéresserons au cas où la fonction V a plusieurs minima locaux et nous supposerons toujours que la diffusion X_ϵ est tuée sur Ω^c si elle existe.

Ce qui suit est très largement tiré des deux articles [9] et [10] de Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gayard et Markus Klein dont nous donnerons plus d'explications (comme par exemple les preuves laissées au lecteur), mais nous ne ferons jamais l'hypothèse de ne pas avoir de symétries.

Dans la suite, l'ensemble Ω ainsi que les autres sous ensembles considérés seront réguliers, c'est à dire un ensemble $A \subset \mathbb{R}^d$ dont le complémentaire admet une frontière continument différentiable.

Précisons dans quel sens V est suffisamment régulière avec les hypothèses suivantes.

Hypothèse 5.0.1.

1. $V \in C^3(\Omega)$ et $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$ est un ouvert connexe
2. Si Ω n'est pas borné alors
 - (a) $\liminf_{x \rightarrow \infty} |\nabla V(x)| = \infty$, et
 - (b) $\liminf_{x \rightarrow \infty} (|\nabla V(x)| - 2\Delta V(x)) = \infty$

Définition 5.0.2. Pour tout ensemble $A, B \subset \Omega$ on définit la hauteur de la selle entre A et B par

$$\hat{V}(A, B) = \inf_{\substack{\omega: [0,1] \rightarrow \Omega \\ \omega(0) \in A, \omega(1) \in B}} \sup_{t \in [0,1]} V(\omega(t)), \quad (5.0.2)$$

où ω est un chemin continu de Ω . Notons $z^*(A, B) \in \Omega$ l'élément qui vérifie

$$V(z^*(A, B)) = \hat{V}(A, B). \quad (5.0.3)$$

Par abus de notation on prend $z^*(x, y)$, avec $x, y \in \Omega$, lorsque $A = \{x\}$ et $B = \{y\}$ sont réduits à un élément.

Remarque 5.0.3. L'hypothèse précédente implique que V a des niveaux exponentiellement tendus, dans le sens que pour tout $a \in \mathbb{R}$,

$$\int_{y: V(y) \geq a} e^{-V(y)/\epsilon} dy \leq C e^{-a/\epsilon}, \quad (5.0.4)$$

où $C = C(a) < \infty$ uniformément pour $\epsilon \leq 1$.

Comme pour les processus de saut Markoviens, la notion de point selle de V va être cruciale. L'ensemble des points selles est intuitivement un sous ensemble de $\mathcal{G}(A, B) = \{z | V(z) = \hat{V}(A, B)\}$ qui ne peut pas être évité par tous les chemins ω qui essayent de rester aussi bas que possible. Nous avons besoin de définir l'ensemble comme suit :

Définition 5.0.4. Posons $\mathcal{P}(A, B)$ l'ensemble des chemins minimaux de A vers B ,

$$\mathcal{P}(A, B) = \{\omega \in \mathcal{C}([0, 1], \Omega) | \omega(0) \in A, \omega(1) \in B, \sup_{t \in [0, 1]} V(\omega(t)) = \hat{V}(A, B)\}. \quad (5.0.5)$$

Un portail $G(A, B)$ est un sous ensemble minimal de $\mathcal{G}(A, B)$ avec la propriété que tous les chemins minimaux intersectent $G(A, B)$. Notons que $G(A, B)$ n'est en général pas unique. Alors définissons l'ensemble $\mathcal{S}(A, B)$ des points selles comme l'union de tous les tunnels $G(A, B)$.

Pour éviter des complications nous faisons l'hypothèse générale que tous les points selles sont non dégénérés dans le sens suivant

Hypothèse 5.0.5.

1. L'ensemble \mathcal{M} des minima locaux de V est fini, et pour deux minima locaux x, y de V l'ensemble $G(x, y)$ est unique et est constitué d'un nombre fini de points isolés $z_i^*(x, y)$.
2. La matrice hessienne de V pour tout minimum local $x_i \in \mathcal{M}$ et tout point selle z_i^* est non dégénérée (i.e. n'a pas de zéro pour valeur propre).

Lorsque l'on considère le domaine Ω non vide et borné nous rencontrerons des situations où les points selles sont dans $\partial\Omega$. Nous préférons éviter cela en considérant exclusivement les situations où le bord n'est jamais atteint par le processus

Hypothèse 5.0.6. Pour toute suite $x_n \in \Omega$ telle que $\lim_{n \rightarrow \infty} x_n \in \partial\Omega$ on a $\lim_{n \rightarrow \infty} V(x_n) = \infty$.

Dans toute la suite de ce chapitre nous supposerons que les trois hypothèses précédentes sont vérifiées. Notre intérêt principal est de connaître la distribution des temps d'arrêt

$$\tau_A = \inf\{t > 0 : X_\epsilon(t) \in A\}, \quad (5.0.6)$$

pour le processus partant d'un minimum $x \in \mathcal{M}$ de V , quand $A = B_\rho(y)$ est une petite boule de rayon ρ et de centre $y \in \mathcal{M}$.

Il existe plusieurs théories pour étudier notre problème comme la méthode des grandes déviations ou l'analyse semi-classique, mais nous allons utiliser la théorie du potentiel. Nous allons donc, dans la sous-section suivante, donner les éléments de la théorie du potentiel ainsi que les résultats obtenus dans le cas asymétrique. Et comme nous verrons que ces résultats ne sont plus valables lorsqu'il y a des symétries, nous utiliserons une partie de ces éléments pour développer, dans les sous-sections après, une approche qui nous permettra de résoudre le problème dans le cas symétrique.

5.1 Éléments de la théorie du potentiel

5.1.1 Définitions et interprétations probabilistes

Dans cette sous-section nous allons donner les définitions et formules, ainsi que certaines interprétations probabilistes, autour de la théorie du potentiel, qui nous permettront de donner les résultats connus dans le cas asymétrique ainsi que d'élaborer une approche dans le cas symétrique.

Rappelons la définition du générateur infinitésimal d'un processus de diffusion.

Définition 5.1.1. Soit X_t solution de l'équation différentielle stochastique

$$dX_t = b(X_t)dt + \sigma(X_t)dW(t). \quad (5.1.1)$$

On définit alors l'opérateur L , appelé générateur infinitésimal de la diffusion, pour toute fonction $\phi \in \mathcal{C}_b^2$ (l'espace des fonctions \mathcal{C}^2 bornées et dont les dérivées premières et secondes sont bornées) et pour tout $x \in \mathbb{R}$ par

$$L\phi(x) = \frac{1}{2}\sigma(x)^2\Delta\phi(x) + \langle b(x), \nabla\phi(x) \rangle. \quad (5.1.2)$$

Le générateur infinitésimal du processus de diffusion (5.0.1) est l'opérateur linéaire L_ϵ suivant :

$$L_\epsilon = -\epsilon e^{V(\cdot)/\epsilon} \nabla e^{-V(\cdot)/\epsilon} \nabla = -\epsilon\Delta + \langle \nabla V(\cdot), \nabla \rangle. \quad (5.1.3)$$

On a volontairement inversé le signe du générateur car cela va rendre toutes les valeurs de celui-ci positives, ce qui nous permettra plus tard de dire que la valeur propre principale est la plus petite valeur propre.

Proposition 5.1.2. *Par construction l'opérateur L_ϵ est symétrique sur $L^2(\Omega, e^{-V(x)/\epsilon} dx)$ avec condition de Dirichlet au bord sur Ω^c nulle.*

Démonstration. Par intégration par partie, on a :

$$\begin{aligned} \langle L_\epsilon f, g \rangle &= \int_{\Omega} \left(-\epsilon e^{V(x)/\epsilon} \nabla e^{-V(x)/\epsilon} \nabla f(x) \right) g(x) e^{-V(x)/\epsilon} dx = \int_{\Omega} -\epsilon \left(\nabla e^{-V(x)/\epsilon} \nabla f(x) \right) g(x) dx \\ &= \int_{\Omega} \epsilon e^{-V(x)/\epsilon} \langle \nabla f(x), \nabla g(x) \rangle dx = \int_{\Omega} -\epsilon f(x) \left(\nabla e^{-V(x)/\epsilon} \nabla g(x) \right) dx \\ &= \int_{\Omega} f(x) \left(-\epsilon e^{V(x)/\epsilon} \nabla e^{-V(x)/\epsilon} \nabla g(x) \right) e^{-V(x)/\epsilon} dx = \langle f, L_\epsilon g \rangle \end{aligned}$$

□

Définition 5.1.3 (Fonction de Green). *Considérons pour $\lambda \in \mathbb{C}$ le problème de Dirichlet suivant :*

$$\begin{aligned} (L_\epsilon - \lambda)f(x) &= g(x), & x \in \Omega, \\ f(x) &= 0, & x \in \Omega^c. \end{aligned} \quad (5.1.4)$$

On appelle fonction de Green $G_\Omega^\lambda(x, y)$ associée au problème de Dirichlet (5.1.4), la fonction qui vérifie :

$$(L_\epsilon - \lambda)G_\Omega^\lambda(x, y) = \delta(x - y). \quad (5.1.5)$$

Proposition 5.1.4. *La solution f , du problème de Dirichlet (5.1.4), s'écrit*

$$f(x) = \int_{\Omega} G_\Omega^\lambda(x, y)g(y)dy. \quad (5.1.6)$$

De plus la fonction de Green est symétrique par rapport à la mesure $e^{-V(x)/\epsilon}$, c'est à dire :

$$G_\Omega^\lambda(x, y) = e^{-V(y)/\epsilon} G_\Omega^\lambda(y, x) e^{V(x)/\epsilon} \quad (5.1.7)$$

Démonstration. On obtient (5.1.6) en multipliant (5.1.5) par $g(y)$ puis d'intégrer par rapport à y sur Ω .

Prenons $h \in L^2(\Omega)$ et posons $k(x) = (L_\epsilon - \lambda)(h)(x)$. On aura donc grâce à la fonction de Green que

$$h(x) = \int_{\Omega} G_\Omega^\lambda(x, y)k(y)dy.$$

En remplaçant $(L_\epsilon - \lambda)(f)$ et h par leurs valeurs on a

$$\int_{\Omega} (L_\epsilon - \lambda)(f)(x)h(x)e^{-V(x)/\epsilon} dx = \int_{\Omega} \int_{\Omega} g(y)G_\Omega^\lambda(y, x)k(x)e^{-V(y)/\epsilon} dy dx.$$

Or, comme L_ϵ est un opérateur symétrique, en remplaçant $(L_\epsilon - \lambda)(h)$ et f par leurs valeurs on a

$$\int_{\Omega} (L_\epsilon - \lambda)(f)(x)h(x)e^{-V(x)/\epsilon} dx = \int_{\Omega} \int_{\Omega} g(y)G_\Omega^\lambda(x, y)k(x)e^{-V(x)/\epsilon} dy dx.$$

Cela reste vrai pour n'importe quelle fonction $h \in L^2(\Omega)$, en utilisant le théorème de représentation de Riesz, on obtient (5.1.7). □

Un outil très souvent utilisé en géométrie différentielle est les relations de Green, dont voici la forme

Proposition 5.1.5. *La première identité de Green est*

$$\int_{\Omega} e^{-V(x)/\epsilon} (\epsilon \nabla \phi(x) \cdot \nabla \psi(x) - \psi(x)(L_{\epsilon} \phi)(x)) dx = \epsilon \int_{\partial \Omega} e^{-V(x)/\epsilon} \psi(x) \partial_{n(x)} \phi(x) d\sigma_{\Omega}(x), \quad (5.1.8)$$

et la deuxième identité de Green est

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} e^{-V(y)/\epsilon} (\phi(x)(L_{\epsilon} - \lambda)\psi(x) - \psi(x)(L_{\epsilon} - \lambda)\phi(x)) dx = \\ \epsilon \int_{\partial \Omega} e^{-V(y)/\epsilon} (\psi(x) \partial_{n(x)} \phi(x) - \phi(x) \partial_{n(x)} \psi(x)) d\sigma_{\Omega}(x), \end{aligned} \quad (5.1.9)$$

où $\phi, \psi \in C^2(\Omega)$.

Définition 5.1.6 (Noyau de Poisson). *Considérons pour $\lambda \in \mathbb{C}$ le problème à valeurs au bord suivant :*

$$\begin{aligned} (L_{\epsilon} - \lambda)f(x) &= 0, & x \in \Omega, \\ f(x) &= \phi(x), & x \in \Omega^c. \end{aligned} \quad (5.1.10)$$

Proposition 5.1.7. *On appelle H_{Ω}^{λ} l'opérateur solution associé qui peut être représenté sous la forme suivante*

$$f(x) = (H_{\Omega}^{\lambda} \phi)(x) = -\epsilon \int_{\partial \Omega} e^{-[V(y)-V(x)]/\epsilon} \phi(y) \partial_{n(y)} G_{\Omega}^{\lambda}(y, x) d\sigma_{\Omega}(y), \quad (5.1.11)$$

où $d\sigma_{\Omega}(y)$ désigne la mesure sur la surface $\partial \Omega$ et $\partial_{n(y)}$ désigne la dérivée dans la direction normale extérieure à la surface $\partial \Omega$ en y agissant sur le premier argument de la fonction $G_{\Omega}^{\lambda}(y, x)$.

Démonstration. La relation entre l'opérateur H_{Ω}^{λ} et la fonction de Green précédente est la conséquence des deux identités de Green de la Proposition 5.1.5 \square

Pour continuer nous allons devoir rappeler la définition des espaces de Sobolev

Définition 5.1.8. *Soient Ω un ouvert quelconque de \mathbb{R}^n , $p \in [1, +\infty]$ et $m \in \mathbb{N}$. On définit l'espace de Sobolev $W^{m,p}(\Omega)$ par*

$$W^{m,p}(\Omega) = \{u \in L^p(\Omega) \mid \forall \alpha \text{ tel que } |\alpha| \leq m, D^{\alpha}u \in L^p(\Omega)\}, \quad (5.1.12)$$

où α est un multi-indice et $D^{\alpha}u$ est une dérivée partielle de u au sens des distributions. On définit l'espace de Sobolev $H^m(\Omega)$ par

$$H^m(\Omega) = W^{m,2}(\Omega). \quad (5.1.13)$$

Définition 5.1.9 (Potentiel d'équilibre et mesure d'équilibre). *Soit $A, D \subset \mathbb{R}^d$ des ensembles réguliers tels que $(A \cup D)^c \subset \text{Dom}(V)$. Alors le potentiel d'équilibre $h_{A,D}^{\lambda}$ est défini comme étant la solution du problème de Dirichlet suivant :*

$$\begin{aligned} (L_{\epsilon} - \lambda)h_{A,D}^{\lambda}(x) &= 0, & x \in (A \cup D)^c, \\ h_{A,D}^{\lambda}(x) &= 1, & x \in A, \\ h_{A,D}^{\lambda}(x) &= 0, & x \in D. \end{aligned} \quad (5.1.14)$$

La mesure d'équilibre $e_{A,D}^{\lambda}$ est définie comme l'unique mesure sur ∂A telle que :

$$h_{A,D}^{\lambda}(x) = \int_{\partial A} G_{A^c}^{\lambda}(x, y) e_{A,D}^{\lambda}(dy). \quad (5.1.15)$$

Remarque 5.1.10. La relation (5.1.15) vient de la représentation du noyau de Poisson (5.1.11) avec $\Omega = A^c$.

Si on considère L_ϵ comme une application de $H^n(\Omega)$ vers $H^{n-2}(\Omega)$ on peut écrire la relation précédente comme ceci :

$$\begin{aligned} (L_\epsilon - \lambda)h_{A,D}^\lambda(x) &= (L_\epsilon - \lambda) \int_{\partial A} G_{A^c}^\lambda(x, y) e_{A,D}^\lambda(dy) = \int_{\partial A} (L_\epsilon - \lambda) G_{A^c}^\lambda(x, y) e_{A,D}^\lambda(dy) \\ &= \int_{\partial A} \delta(x - y) e_{A,D}^\lambda(dy) = e_{A,D}^\lambda(dx) \end{aligned} \quad (5.1.16)$$

Grâce à la seconde identité de Green (5.1.9) et la représentation du noyau de Poisson (5.1.11) on a :

$$(L_\epsilon - \lambda)h_{A,D}^\lambda(x) = \epsilon \partial_{n(x)} h_{A,D}^\lambda(x) d\sigma_{A \cup D}(x) - \lambda \mathbb{1}_A dx \quad (5.1.17)$$

Définition 5.1.11 (Capacité). *La capacité, pour $A, D \subset \Omega$ et $\lambda \in \mathbb{R}$, est définie par :*

$$\text{cap}_A^\lambda(D) = \int_{\partial A} e^{-F(y)/\epsilon} e_{A,D}^\lambda(dy). \quad (5.1.18)$$

En utilisant la deuxième identité de Green (5.1.9) on déduit que :

$$\text{cap}_A^\lambda(D) = \epsilon \int_{(A \cup D)^c} e^{-F(x)/\epsilon} \left[\|\nabla h_{A,D}^\lambda(x)\|_2^2 - \frac{\lambda}{\epsilon} (h_{A,D}^\lambda(x))^2 \right] dx \equiv \Phi_{(A \cup D)^c}^\lambda(h_{A,D}^\lambda), \quad (5.1.19)$$

où $\Phi_{(A \cup D)^c}^\lambda$ est appelée la forme de Dirichlet associée à l'opérateur $L_\epsilon - \lambda$ sur Ω .

Une conséquence fondamentale de la relation précédente est la représentation variationnelle de la capacité si $\lambda \in \mathbb{R}_-$:

$$\text{cap}_A^\lambda(D) = \inf_{h \in \mathcal{H}_{A,D}} \Phi_{(A \cup D)^c}^\lambda(h), \quad (5.1.20)$$

où $\mathcal{H}_{A,D}$ désigne l'ensemble de fonctions suivant

$$\mathcal{H}_{A,D} = \{h \in W^{1,2}(\Omega) \mid h(x) = 0 \text{ pour } x \in D, h(x) = 1 \text{ pour } x \in A\}. \quad (5.1.21)$$

Interprétation probabiliste du potentiel d'équilibre. Si $\lambda = 0$ le potentiel d'équilibre et la mesure d'équilibre ont l'interprétation probabiliste suivante :

$$h_{A,D}(x) \equiv h_{A,D}^0(x) = \mathbb{P}_x[\tau_A < \tau_D], \quad (5.1.22)$$

$$e_{A,D}(dy) = \lim_{t \rightarrow 0} t^{-1} \mathbb{E}_y \mathbb{P}_{X_\epsilon(t)}[\tau_A < \tau_D] dy. \quad (5.1.23)$$

De plus, pour tout λ et tout $x \in (A \cup D)^c$, on a :

$$h_{A,D}(x) = \mathbb{E}_x e^{\lambda \tau_A} \mathbb{1}_{\tau_A < \tau_D}, \quad (5.1.24)$$

cela implique

$$\frac{d}{d\lambda} h_{A,D}^{\lambda=0}(x) = \mathbb{E}_x \tau_A \mathbb{1}_{\tau_A < \tau_D}. \quad (5.1.25)$$

De cette dérivation on déduit que la fonction

$$w_{A,D}(x) = \begin{cases} \mathbb{E}_x \tau_A \mathbb{1}_{\tau_A < \tau_D}, & x \in (A \cup D)^c, \\ 0, & x \in (A \cup D), \end{cases} \quad (5.1.26)$$

est solution du problème de Dirichlet

$$\begin{aligned} L_\epsilon w_{A,D}(x) &= h_{A,D}(x), & x \in (A \cup D)^c, \\ w_{A,D}(x) &= 0, & x \in (A \cup D). \end{aligned} \quad (5.1.27)$$

En utilisant la fonction de Green (5.1.6) on obtient :

$$\mathbb{E}_x \tau_A \mathbf{1}_{\tau_A < \tau_D} = \int_{(A \cup D)^c} G_{(A \cup D)^c}(x, y) h_{A, D}(y) dy. \quad (5.1.28)$$

Remarquons que dans le cas particulier où $D = \emptyset$ on obtient le problème de Dirichlet avec la représentation

$$\begin{aligned} L_\epsilon w_A(x) &= 1, & x \in A^c, \\ w_A(x) &= 0, & x \in A, \end{aligned} \quad (5.1.29)$$

$$\mathbb{E}_x \tau_A = \int_{A^c} G_{A^c}(x, y) dy. \quad (5.1.30)$$

En les relations (5.1.15), (5.1.28), (5.1.30) et avec le théorème de Fubini on obtient :

$$\begin{aligned} \int_{\partial B_\rho(x)} e^{-V(z)/\epsilon} \mathbb{E}_z \tau_A e_{B_\rho(x), A}(dz) &= \int_{A^c} e^{-V(y)/\epsilon} \int_{\partial B_\rho(x)} G_{A^c}(y, z) e_{B_\rho(x), A}(dz) dy \\ &= \int_{A^c} e^{-V(y)/\epsilon} h_{B_\rho(x), A}(y) dy \end{aligned} \quad (5.1.31)$$

et

$$\int_{\partial B_\rho(x)} e^{-V(z)/\epsilon} \mathbb{E}_z \tau_A \mathbf{1}_{\tau_A < \tau_D} e_{B_\rho(x), A \cup D}(dz) = \int_{(A \cup D)^c} e^{-V(y)/\epsilon} h_{B_\rho(x), A \cup D}(y) h_{A, D} dy \quad (5.1.32)$$

5.1.2 Résultats

Nous pouvons maintenant donner les différents résultats principaux obtenus par Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gayard et Markus Klein (voir [9] et [10]). Tout d'abord l'estimation des capacités.

Théorème 5.1.12 (voir [9]). *Soient $x, y \in \mathcal{M}$ et soit $\rho > 0$ suffisamment petit tel que*

$$z^*(x, y) \notin B_\rho(x) \text{ et } z^*(x, y) \notin B_\rho(y), \quad (5.1.33)$$

où $B_\rho(x)$ et $B_\rho(y)$ sont des boules de rayon ρ et de centre respectif x et y . Si

$$\mathcal{S}(B_\rho(x), B_\rho(y)) = \{z_1^*, \dots, z_n^*\}, \quad (5.1.34)$$

alors on a :

$$\text{cap}_{B_\rho(x)}(B_\rho(y)) = e^{-V(z^*(x, y))/\epsilon} \frac{(2\pi\epsilon)^{d/2}}{2\pi} \sum_{i=1}^k \frac{|\lambda_1^*(z_i^*)|}{\sqrt{|\det(\nabla^2 V(z_i^*))|}} (1 + O(\sqrt{\epsilon} |\ln \epsilon|)), \quad (5.1.35)$$

où $\lambda_1^*(z_i^*)$ désigne la valeur propre négative de la matrice Hessienne en z_i^*

Remarquons que ce résultat ne suppose pas l'absence de symétrie. En utilisant l'estimation des capacités et des estimations a priori sur les potentiels d'équilibre on obtient l'estimation des espérances de temps d'atteinte.

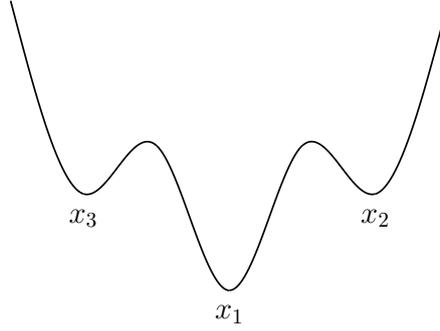
Théorème 5.1.13 (voir [9]). *Soit x_i un minimum local de V et soit D un sous ensemble de \mathbb{R}^d tel que*

1. Si $\mathcal{M}_i = \{y_1, \dots, y_k\} \subset \mathcal{M}$ compte tous les minima locaux de V tel que $V(y_i) \leq V(x_i)$ alors $\cup_{j=1}^k B_\epsilon(y_j) \subset D$,
2. $\text{dist}(\mathcal{S}(x_i, \mathcal{M}_i), D) \geq \delta > 0$ pour un certain δ indépendant de ϵ .

Alors

$$\mathbb{E}_{x_i} \tau_D = \frac{2\pi e^{[V(z^*(x_i, D)) - V(x_i)]/\epsilon}}{\sqrt{|\det(\nabla^2 V(x_i))|} \sum_{j=1}^k \frac{|\lambda_1^*(z_j^*)|}{\sqrt{|\det(\nabla^2 V(z_j^*))|}}} (1 + O(\sqrt{\epsilon} |\ln \epsilon|)). \quad (5.1.36)$$

Remarquons que c'est à partir de ce résultat que nous devons être dans le cas asymétrique. En effet si on est dans le cas du potentiel suivant



alors nous ne pouvons pas calculer $\mathbb{E}_{x_3} \tau_{B_\epsilon(x_1)}$.

Remarque 5.1.14. Dans le cas d'un seul point selle z^* , la formule (5.1.36) se réduit à la formule d'Eyring classique

$$\mathbb{E}_{x_i} \tau_D = \frac{2\pi}{|\lambda_1^*(z^*)|} \frac{\sqrt{|\det(\nabla^2 F(z^*))|}}{\sqrt{|\det(\nabla^2 F(x_i))|}} e^{[F(z^*) - F(x_i)]/\epsilon} (1 + O(\sqrt{\epsilon} |\ln \epsilon|)). \quad (5.1.37)$$

En continuant encore l'étude dans le cas asymétrique, nous pouvons donner aussi des estimations sur les valeurs propres et fonctions propres du générateur infinitésimal L_ϵ .

Théorème 5.1.15 (voir [10]). *Supposons que V a n minima locaux x_1, \dots, x_n et qu'il existe $\theta > 0$ tel que les minima locaux de V peuvent être ordonnés de la manière suivante, avec $\mathcal{M}_k = \{x_1, \dots, x_k\}$ et $\mathcal{M}_0 = \Omega^c$,*

$$V(z^*(x_k, \mathcal{M}_{k-1})) - V(x_k) \leq \min_{i < k} V(z^*(x_i, \mathcal{M}_k \setminus x_i)) - V(x_i) - \theta, \quad (5.1.38)$$

pour $k \in \{1, \dots, n\}$. On pose

$$B_i = B_\epsilon(x_i) \text{ et } S_k = \bigcup_{i=1}^k B_i \text{ et } h_k(y) = h_{B_k, S_{k-1}}(y). \quad (5.1.39)$$

Supposons que tous les points selle $z^*(x_k, \mathcal{M}_{k-1})$ sont uniques. Alors il existe $\delta > 0$ tel que les n valeurs propres exponentiellement petite $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n$ du générateur infinitésimal L_ϵ vérifient

$$\lambda_1 = 0, \quad (5.1.40)$$

et pour $k \in \{2, \dots, n\}$

$$\begin{aligned} \lambda_k &= \frac{\text{cap}_{B_k}(S_{k-1})}{\|h_k\|_2^2} (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) \\ &= \frac{1}{\mathbb{E}_{x_k} \tau_{S_{k-1}}} (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) \\ &= \frac{|\lambda_1^*(z^*(x_k, \mathcal{M}_{k-1}))|}{2\pi} \sqrt{\frac{\det(\nabla^2 V(x_k))}{|\det(\nabla^2 V(z^*(x_k, \mathcal{M}_{k-1})))|}} e^{-[V(z^*(x_k, \mathcal{M}_{k-1})) - V(x_k)]/\epsilon} \\ &\quad \times (1 + \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon} |\ln \epsilon|)), \end{aligned} \quad (5.1.41)$$

où $\lambda_1^*(z^*)$ désigne l'unique valeur propre négative de la matrice hessienne de V au point selle z^* .

Remarquons que la relation (5.1.38) est la même relation que (4.1.14) dans l'hypothèse de hiérarchie métastable 4.1.3 du chapitre précédent.

Théorème 5.1.16 (voir [10]). *Sous les hypothèses du théorème précédent, si ϕ_k désigne la fonction propre normalisée correspondant à la valeur propre λ_k , alors il existe $\delta > 0$ tel que*

$$\phi_k = \frac{h_{B_\epsilon(x_k), S_{k-1}(y)}(y)}{\|h_{B_\epsilon(x_k), S_{k-1}(y)}\|_2} (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), \quad (5.1.42)$$

où $h_{B_\epsilon(x_k), S_{k-1}(y)}(y) = \mathbb{P}_y [\tau_{B_\epsilon(x_k)} < \tau_{S_{k-1}}]$.

5.2 Éléments du cas symétrique

5.2.1 Estimations spectrales

Définition 5.2.1. *Soit $D \subset \Omega \subset \mathbb{R}^d$ un ensemble ouvert. On notera $\bar{\lambda}(D)$ la valeur propre principale (la plus petite valeur propre non nulle) du problème de Dirichlet*

$$\begin{aligned} (L_\epsilon - \lambda)f(x) &= 0, & x \in D, \\ f(x) &= 0, & x \in D^c, \end{aligned} \quad (5.2.1)$$

où $D^c = \Omega \setminus D$ et on utilisera la notation $L_\epsilon^{D^c}$ pour indiquer l'opérateur de Dirichlet correspondant au problème (5.2.1).

Le lemme suivant est un résultat classique de Donsker et Varadhan [14].

Lemme 5.2.2. *La valeur propre principale $\bar{\lambda}(D)$ vérifie*

$$\bar{\lambda}(D) \geq \frac{1}{\sup_{x \in D} \mathbb{E}_x \tau_{D^c}} \quad (5.2.2)$$

On remarque que dans le cas d'une diffusion sur un compact, ce lemme donne une bonne estimation, mais si D n'est pas borné alors le sup, dans le membre de droite, peut être infini et l'estimation devient inutile. Nous allons donc donner une version améliorée de ce lemme.

Lemme 5.2.3 ([10], Lemme 2.2). *Soit ϕ_D la fonction propre normalisée associée à la valeur propre principale de l'opérateur L_ϵ^D . Soit $A \subset D$ un ensemble compact, alors*

$$\bar{\lambda}(D) \geq \frac{1}{\sup_{x \in A} \mathbb{E}_x \tau_{A^c}} \left(1 - \int_{D \setminus A} e^{-V(y)/\epsilon} |\phi_D(y)|^2 dy \right). \quad (5.2.3)$$

De plus, pour tout $\delta > 0$ il existe un ensemble borné $A \subset D$, indépendant de ϵ tel que

$$\bar{\lambda}(D) \geq \frac{1}{\sup_{x \in A} \mathbb{E}_x \tau_{A^c} (1 + \delta)} \quad (5.2.4)$$

Démonstration. Soit $w(x)$ la solution du problème de Dirichlet

$$\begin{aligned} L_\epsilon w(x) &= 1, & x \in A \\ w(x) &= 0, & x \in A^c \end{aligned}$$

Remarquons que par la relation (5.1.26) on a $w(x) = \mathbb{E}_x \tau_{A^c}$. En minorant l'intégrale sur D par l'intégrale sur A car $A \subset D$, en faisant une intégration par partie puis en écrivant les composantes du gradient comme une limite, on obtient

$$\int_D e^{-V(x)/\epsilon} \phi(x) (L_\epsilon \phi)(x) dx \geq \lim_{h \rightarrow 0} \frac{1}{h^2} \int_A e^{-V(x)/\epsilon} \sum_{i=1}^d (\phi(x + he_i) - \phi(x))^2 dx$$

En utilisant l'inégalité de Young

$$ab \leq \frac{1}{2} \left(Ca^2 + \frac{b^2}{C} \right),$$

avec $a = \phi(x + he_i)$, $b = \phi(x)$ et $C = \frac{w(x)}{w(x+he_i)}$ on obtient

$$(\phi(x + he_i) - \phi(x))^2 \geq \left(\frac{\phi(x + he_i)^2}{w(x + he_i)} - \frac{\phi(x)^2}{w(x)} \right) (w(x + he_i) - w(x))$$

On en déduit alors

$$\int_D e^{-V(x)/\epsilon} \phi(x) (L_\epsilon \phi)(x) dx \geq \int_A e^{-V(x)/\epsilon} \nabla \frac{\phi^2}{w}(x) \nabla w(x) dx$$

En refaisant une intégration par partie et en se servant du fait que $L_\epsilon w(x) = 1$ pour $x \in A$ on a alors

$$\int_D e^{-V(x)/\epsilon} \phi(x) (L_\epsilon \phi)(x) dx \geq \int_A e^{-V(x)/\epsilon} \frac{\phi^2(x)}{w(x)} dx$$

En minorant $\frac{1}{w(x)}$ par $\frac{1}{\sup_{x \in A} w(x)}$ et en le sortant de l'intégrale on obtient

$$\int_D e^{-V(x)/\epsilon} \phi(x) (L_\epsilon \phi)(x) dx \geq \frac{1}{\sup_{x \in A} w(x)} \int_A e^{-V(x)/\epsilon} \phi^2(x) dx$$

En choisissant ϕ comme la fonction propre normalisée associée à la valeur propre principale $\bar{\lambda}(D)$ de l'opérateur L_ϵ^D on a

$$\int_D e^{-V(x)/\epsilon} \phi(x) (L_\epsilon \phi)(x) dx = \bar{\lambda}(D),$$

d'où la première relation. On peut supposer sans perte de généralité que la fonction V est tout le temps positive. Pour la deuxième relation introduisons la fonction

$$v(y) = e^{-V(y)/2\epsilon} \phi_D(y),$$

qui est la fonction propre fondamentale de l'opérateur

$$H_\epsilon = e^{-V(\cdot)/2\epsilon} L_\epsilon e^{V(\cdot)/2\epsilon},$$

qui est un opérateur symétrique sur $L^2(D, dy)$. Par une estimation d'Agmon semi-classique on obtient que pour tout $\gamma > 0$ il existe $C_\gamma \in \mathbb{R}_+$ indépendant de ϵ tel que

$$\int_D e^{(1-\gamma)\tilde{V}(y)/\epsilon} |v(y)|^2 dy = \int_D e^{-\gamma\tilde{V}(y)/\epsilon} |\phi_D(y)|^2 dy < C_\gamma < \infty,$$

où $\tilde{V}(y) = V(y) - \min_{x \in \mathcal{M}} V(x)$. Donc pour $\gamma = 1$, il existe $C \in \mathbb{R}_+$ indépendant de ϵ tel que

$$\int_D e^{-\tilde{V}(y)/\epsilon} |\phi_D(y)|^2 dy < C_\gamma e^{-\min_{x \in \mathcal{M}} V(x)/\epsilon} < C.$$

Soit $\delta > 0$. Alors il existe $A \subset D$ borné et indépendant de ϵ tel que

$$\int_{D \setminus A} e^{-\tilde{V}(y)/\epsilon} |\phi_D(y)|^2 dy < \frac{\delta}{1 + \delta},$$

on en déduit donc la seconde relation. \square

Suivant le choix de D nous allons avoir deux types d'estimation. Nous allons d'abord voir que si D ne contient pas de minima locaux de V alors $\bar{\lambda}(D)$ est polynomialement petite en ϵ .

Lemme 5.2.4 ([10], Lemme 2.3). *Supposons que $D \cap \mathcal{M}_\epsilon = \emptyset$ où*

$$\mathcal{M}_\epsilon = \{z \in \Omega \mid \text{dist}(z, \mathcal{M}) \leq \epsilon\}. \quad (5.2.5)$$

Alors il existe une constante $C \in \mathbb{R}_+$ telle que

$$\sup_{x \in D} \mathbb{E}_x \tau_{D^c} \leq C \epsilon^{-d+1} \sup_{x \in D} \int_{\{y \in D \mid V(y) \leq V(x)\}} dy. \quad (5.2.6)$$

Démonstration. De la relation (5.1.31) on obtient facilement la relation suivante

$$\int_D e^{-V(y)/\epsilon} h_{B_\rho(x), D^c}(y) dy \geq \inf_{z \in \partial B_\rho(x)} \mathbb{E}_z \tau_{D^c} \text{cap}_{B_\rho(x)}(D^c).$$

En utilisant le Lemme 4.1 de [9] pour $R = \rho = c\epsilon$ on a

$$\sup_{z \in \partial B_\rho(x)} \mathbb{E}_z \tau_{D^c} \leq C \inf_{z \in \partial B_\rho(x)} \mathbb{E}_z \tau_{D^c},$$

donc en combinant ces deux inégalités on obtient

$$\sup_{z \in \partial B_\rho(x)} \mathbb{E}_z \tau_{D^c} \leq \frac{\int_D e^{-V(y)/\epsilon} h_{B_\rho(x), D^c}(y) dy}{\text{cap}_{B_\rho(x)}(D^c)}.$$

On va alors séparer l'intégrale sur D en deux parties, la première sur $\{y \in D \mid V(y) > V(x)\}$ et la deuxième sur $\{y \in D \mid V(y) \leq V(x)\}$. Dans la première on va majorer $h_{B_\rho(x), D^c}(y)$ par 1 puis dans la deuxième on va le majorer en utilisant la proposition 4.3 de [9], ce qui nous donne

$$\begin{aligned} \sup_{z \in \partial B_\rho(x)} \mathbb{E}_z \tau_{D^c} &\leq C \frac{\int_{\{y \in D \mid V(y) > V(x)\}} e^{-V(y)/\epsilon} dy}{\text{cap}_{B_\rho(x)}(D^c)} \\ &\quad + C \frac{1}{\text{cap}_{B_\rho(x)}(D^c)} \int_{\{y \in D \mid V(y) \leq V(x)\}} e^{-V(y)/\epsilon} \frac{\text{cap}_{B_\rho(y)}(B_\rho(y))}{\text{cap}_{B_\rho(y)}(D^c)} dy. \end{aligned}$$

En utilisant les bornes inférieures et supérieures sur la capacité de la proposition 4.7 de [9], on obtient

$$\begin{aligned} \sup_{z \in \partial B_\rho(x)} \mathbb{E}_z \tau_{D^c} &\leq C' \epsilon \rho^{-d+2} e^{V(x)/\epsilon} \int_{\{y \in D \mid V(y) > V(x)\}} dy \\ &\quad + C'' \epsilon \rho^{-d+2} \int_{\{y \in D \mid V(y) \leq V(x)\}} dy. \end{aligned}$$

Par les hypothèses faites sur le potentiel V , nous avons la relation (5.0.4), donc la première intégrale est majorée par le produit d'une constante par $e^{-V(x)/\epsilon}$ et quitte à augmenter la deuxième constante C'' , on a bien le résultat voulu. \square

Corollaire 5.2.5 ([10], Corollaire 2.4). *Supposons que $D \cap \mathcal{M}_\epsilon = \emptyset$, alors il existe une constante $C \in \mathbb{R}_+$ indépendante de ϵ telle que*

$$\bar{\lambda}(D) \geq C \epsilon^{d-1}. \quad (5.2.7)$$

Démonstration. Si D est un ensemble borné alors il suffit d'appliquer les lemmes 5.2.2 et 5.2.4 et de remarquer que $\sup_{x \in D} \int_{\{y \in D \mid V(y) \leq V(x)\}} dy$ est fini car D est borné. Si D n'est pas borné alors par le lemme 5.2.3 en prenant par exemple $\delta = 1$ il existe $A \subset D$ borné et indépendant de ϵ tel que

$$\bar{\lambda}(D) \geq \frac{1}{2 \sup_{x \in A} \mathbb{E}_x \tau_{A^c}},$$

puis comme $A \cap \mathcal{M}_\epsilon = \emptyset$ car $D \cap \mathcal{M}_\epsilon = \emptyset$ alors en appliquant le lemme 5.2.4, avec A au lieu de D , et comme $\sup_{x \in A} \int_{\{y \in A \mid V(y) \leq V(x)\}} dy$ est fini car A est borné on obtient donc le résultat. \square

Puis dans le cas D où contient des minima locaux de V , on peut donner une estimation à l'aide des capacités.

Lemme 5.2.6 ([10], Lemme 2.5). *Soit ϕ_D la fonction propre normalisée associée à la valeur propre principale de l'opérateur L_ϵ^D et soit $\mathcal{N} \subset \mathcal{M}$ un ensemble non vide et posons*

$$\mathcal{N}_\epsilon = \{y \in \mathbb{R}^d \mid \text{dist}(y, \mathcal{N}) \leq \epsilon\}. \quad (5.2.8)$$

Supposons que $\mathcal{N}_\epsilon \subset D$ et que $(D \setminus \mathcal{N}_\epsilon) \cap \mathcal{M} = \emptyset$ alors

$$\frac{1}{\bar{\lambda}(D)} \leq \sum_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} \frac{\int_{B_\epsilon(x_i)} e^{-V(y)/\epsilon} dy}{\text{cap}_{B_\epsilon(x_i)}(D \setminus B_\epsilon(x_i))} \quad (5.2.9)$$

Démonstration. Supposons D bornée et décomposons $\bar{\lambda}(D)$ de la manière suivante

$$\bar{\lambda}(D) = \int_{D \setminus \bigcup_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} B_\epsilon(x_i)} e^{-V(y)/\epsilon} \phi_D(y) (L_\epsilon \phi_D)(y) dy + \sum_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} \int_{B_\epsilon(x_i)} e^{-V(y)/\epsilon} \phi_D(y) (L_\epsilon \phi_D)(y) dy$$

En utilisant le même raisonnement que dans la preuve du Lemme 5.2.3 pour chaque intégrale on a

$$\begin{aligned} \bar{\lambda}(D) &\geq \frac{1}{\sup_{x \in D \setminus \bigcup_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} B_\epsilon(x_i)} \mathbb{E}_x \tau_{(D \setminus \bigcup_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} B_\epsilon(x_i))^c}} \int_{D \setminus \bigcup_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} B_\epsilon(x_i)} e^{-V(y)/\epsilon} \phi_D^2(y) dy \\ &\quad + \sum_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} \frac{1}{\sup_{x \in B_\epsilon(x_i)} \mathbb{E}_x \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)}} \int_{B_\epsilon(x_i)} e^{-V(y)/\epsilon} \phi_D(y)^2 dy. \end{aligned}$$

Or $D \setminus \bigcup_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} B_\epsilon(x_i)$ ne contient pas de minima locaux donc par le Lemme 5.2.4 on a

$$\frac{1}{\sup_{x \in D \setminus \bigcup_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} B_\epsilon(x_i)} \mathbb{E}_x \tau_{(D \setminus \bigcup_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} B_\epsilon(x_i))^c}} \geq C\epsilon^{d-1}.$$

De plus pour ϵ suffisamment petit

$$\sup_{x \in B_\epsilon(x_i)} \mathbb{E}_x \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)} = \mathbb{E}_{x_i} \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)},$$

et on a

$$C\epsilon^{d-1} \gg \frac{1}{\mathbb{E}_{x_i} \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)}}.$$

Donc minorant tous les facteurs par le minimum des $\frac{1}{\mathbb{E}_{x_i} \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)}}$ et en regroupant les intégrales on a

$$\bar{\lambda}(D) \geq \min_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} \frac{1}{\mathbb{E}_{x_i} \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)}} \int_D e^{-V(y)/\epsilon} \phi_D(y)^2 dy,$$

et comme ϕ_D est normalisé alors l'intégrale vaut 1, en notant j l'indice réalisant le minimum et en passant à l'inverse, on a

$$\bar{\lambda}(D) \leq \mathbb{E}_{x_j} \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_j)} \leq \sum_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} \mathbb{E}_{x_i} \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)}.$$

En utilisant la proposition 6.1 de [9] on a

$$\mathbb{E}_{x_i} \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)} = \frac{\int_{(D \setminus B_\epsilon(x_i))^c} e^{-V(y)/\epsilon} h_{B_\epsilon(x_i), D \setminus B_\epsilon(x_i)}(y) dy}{\text{cap}_{B_\epsilon(x_i)}(D \setminus B_\epsilon(x_i))}.$$

Puis en utilisant (5.1.22) on a $h_{B_\epsilon(x_i), D \setminus B_\epsilon(x_i)}(y) = \mathbb{P}^y[\tau_{B_\epsilon(x_i)} < \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)}]$, qui est nulle quand $y \in D^c$ donc

$$\mathbb{E}_{x_i} \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)} = \frac{\int_{B_\epsilon(x_i)} e^{-V(y)/\epsilon} dy}{\text{cap}_{B_\epsilon(x_i)}(D \setminus B_\epsilon(x_i))}.$$

d'où le résultat.

Dans le cas où D n'est pas borné, soit $\delta > 0$, on sait par le Lemme 5.2.3 qu'il existe A indépendant de ϵ tel que

$$1 - \int_{D \setminus A} e^{-V(y)/\epsilon} \phi_D^2(y) dy \geq \frac{1}{1 + \delta}.$$

En minorant directement $\bar{\lambda}(D)$ de la manière suivante

$$\bar{\lambda}(D) \geq \int_A e^{-V(y)/\epsilon} \phi_D(y) (L_\epsilon \phi_D)(y) dy,$$

puis en faisant le même raisonnement que précédemment, on obtient

$$\bar{\lambda}(D) \geq \min_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} \frac{1}{\mathbb{E}_{x_i} \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)}} \left(1 - \int_{D \setminus A} e^{-V(y)/\epsilon} \phi_D^2(y) dy \right) \geq \min_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} \frac{1}{\mathbb{E}_{x_i} \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)}} \frac{1}{1 + \delta}.$$

Et comme c'est valable pour tout δ alors

$$\bar{\lambda}(D) \geq \min_{i: x_i \in \mathcal{N}_\epsilon} \frac{1}{\mathbb{E}_{x_i} \tau_{D \setminus B_\epsilon(x_i)}},$$

puis on conclut comme précédemment pour obtenir le résultat. \square

5.2.2 Stratégie générale

Avant de rentrer dans le cœur du sujet, nous allons expliquer la stratégie générale. Considérons les boules de rayon ϵ centrée sur des minima locaux $B_i = B_\epsilon(x_i)$ pour $i \in \llbracket 1, k \rrbracket$. Soit $\bar{\lambda}_k$ la valeur propre principale du problème de Dirichlet

$$\begin{aligned} (L_\epsilon - \lambda)f(x) &= 0, & x \in \Omega \setminus \partial S_k, \\ f(x) &= 0, & x \in \partial S_k, \end{aligned} \tag{5.2.10}$$

où $S_k = \bigcup_{i=1}^k B_i$. Considérons, pour $\lambda < \bar{\lambda}_k$, la solution du problème de Dirichlet

$$\begin{aligned} (L_\epsilon - \lambda)f^\lambda(x) &= 0, & x \in \Omega \setminus \partial S_k, \\ f^\lambda(x) &= \phi(x), & x \in \partial S_k. \end{aligned} \tag{5.2.11}$$

L'idée est de construire une fonction propre de l'opérateur sur tout Ω comme une solution du problème (5.2.11) pour une fonction ϕ bien choisie. En effet nous pouvons voir que, si λ est une valeur propre de L_ϵ et si on choisit ϕ comme fonction propre associée à la valeur propre λ , alors $f^\lambda = \phi$ sur Ω . Pour s'en convaincre, remarquons d'abord que l'on a l'égalité sur ∂S_k , puis que pour tout $x \in \Omega \setminus S_k$ on a

$$(L_\epsilon - \lambda)^{S_k} (f^\lambda - \phi)(x) = (L_\epsilon - \lambda)(f^\lambda - \phi)(x) = 0. \tag{5.2.12}$$

Comme λ n'est pas dans le spectre de $L_\epsilon^{S_k}$, alors $(L_\epsilon - \lambda)^{S_k}$ est inversible et donc on obtient $f^\lambda = \phi$ sur $\Omega \setminus S_k$. En faisant le même raisonnement sur l'intérieur de S_k on obtient aussi l'égalité. D'où l'égalité sur tout Ω .

Alors $\lambda < \bar{\lambda}_k$ est une valeur propre de L_ϵ si et seulement si on peut trouver une fonction sur ∂S_k telle que la solution du problème de Dirichlet (5.2.11) est une fonction propre de L_ϵ associée à la

valeur propre λ . Donc n'importe toutes les valeurs propres λ inférieur strictement à la valeur propre principale $\bar{\lambda}_k$ peuvent être représentées comme une solution du problème de Dirichlet (5.2.11).

Le problème des valeurs propres se résume donc à trouver pour quelle valeur λ pour une fonction ϕ bien choisie sur les bords ∂B_i on a $(L_\epsilon - \lambda)f^\lambda = 0$ sur tout Ω . On peut interpréter $(L_\epsilon - \lambda)f^\lambda$ comme une mesure concentrée sur ∂S_k . C'est à dire, pour tout g fonction test qui s'annule sur Ω^c

$$\begin{aligned}
 \int_{\Omega} e^{-V(y)/\epsilon} g(y) (L_\epsilon - \lambda) f^\lambda(y) dy &= \int_{\Omega} e^{-V(y)/\epsilon} f(y) (L_\epsilon - \lambda) g^\lambda(y) dy \\
 &= \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} f(y) (L_\epsilon - \lambda) g^\lambda(y) dy + \int_{S_k} e^{-V(y)/\epsilon} f(y) (L_\epsilon - \lambda) g^\lambda(y) dy \\
 &= \epsilon \int_{\partial S_k} e^{-V(y)/\epsilon} (g(y) \partial_{n(y)} f^\lambda(y) - f^\lambda(y) \partial_{n(y)} g(y)) d\sigma_{S_k}(y) \\
 &\quad + \epsilon \int_{\partial S_k} e^{-V(y)/\epsilon} (g(y) \partial_{-n(y)} f^\lambda(y) - f^\lambda(y) \partial_{-n(y)} g(y)) d\sigma_{S_k}(y) \\
 &= \epsilon \int_{\partial S_k} e^{-V(y)/\epsilon} (g(y) \partial_{n(y)} f^\lambda(y) + g(y) \partial_{-n(y)} f^\lambda(y)) d\sigma_{S_k}(y),
 \end{aligned} \tag{5.2.13}$$

où $d\sigma_{S_k}$ est la mesure euclidienne de surface sur ∂S_k et $\partial_{\pm n(y)}$ désigne le vecteur normal extérieur et intérieur en $y \in \partial S_k$. Demander que la mesure $(L_\epsilon - \lambda)f^\lambda$ soit nulle est équivalent à demander que la mesure

$$\epsilon e^{-V(y)/\epsilon} (\partial_{n(y)} f^\lambda(y) + \partial_{-n(y)} f^\lambda(y)) d\sigma_{S_k}(y), \tag{5.2.14}$$

soit nulle. Remarquons que ce problème deviendrait bien plus simple si on avait que la fonction ϕ est constante sur les bords ∂B_i . Malgré que cela ne soit pas vrai, nous verrons que soit la fonction ϕ ne change pas de signe autour d'un minimum, et par conséquent on va pouvoir utiliser des inégalités de Harnack et Hölder. Soit la fonction ϕ change de signe et dans ce cas elle est exponentiellement petite.

5.2.3 Matrice de capacité

Avant de définir la matrice de capacité nous allons devoir établir quelques estimations sur le comportement des fonctions propres sur les voisinages des minima locaux du potentiel V . Pour l'analyse des fonctions harmoniques qui ne sont pas nécessairement positives, nous avons besoin d'une estimation pour les fonctions sous-harmoniques qui nous permet de comparer l'oscillation à la norme L^2 (un principe de maximum local).

Lemme 5.2.7 ([10], Lemme 4.1). *Soit ϕ une solution forte de $(L_\epsilon - \lambda)\phi = 0$ sur une boule $B_{c\sqrt{\epsilon}}(x)$. Alors il existe une constante C indépendante de ϵ telle que*

$$\text{osc}_{B_{c\sqrt{\epsilon}}(x)} \phi \leq C \epsilon^{-d/4} \left(\int_{B_{2c\sqrt{\epsilon}}(x)} \phi(y)^2 dy \right)^{1/2} \tag{5.2.15}$$

Démonstration. Voir [17], Théorème 9.20. □

Notre but est de montrer que, dans les boules de rayon $\sqrt{\epsilon}$ centrée sur les minima du potentiel V , les fonctions propres associées aux valeurs propres exponentiellement petite de L_ϵ sont soit de signe constant soit exponentiellement petites. Cela est suggéré par le résultat suivant que nous avons pris de [23] (Chapitre 8, Proposition 2.2) :

Proposition 5.2.8 ([10], Proposition 4.2). *Soit ϕ une fonction propre normalisée de L_ϵ correspondant à l'une des $|\mathcal{M}|$ valeurs propres. Soit $\gamma < \hat{\gamma} = \min_{x,y \in \mathcal{M}} (\hat{V}(x,y) - V(y))$. Soit D_i l'ensemble des points $y \in \Omega$ tel que la solution de l'équation différentielle $\frac{d}{dt} y(t) = -\nabla V(y(t))$, avec pour condition initiale $y(0) = y$, converge vers $x_i \in \mathcal{M}$. Alors il existe une constante $C < \infty$ dépendante uniquement de γ et des constantes c_i telles que*

$$\|\phi - \sum_i c_i \mathbf{1}_{D_i}\|_2 \leq C e^{-\gamma/\epsilon} \tag{5.2.16}$$

Démonstration. Voir [23]. □

Cette estimation ne permet pas de conclure que la fonction propre normalisée Φ ne change pas de signe au voisinage des minima. Nous montrerons, pour un minimum donnée, que Φ ne change pas de signe si la contribution de ϕ est importante. Pour $D \subset \Omega$ définissons

$$\|f\|_{2,D} = \left(\int_D e^{-V(y)/\epsilon} f(y)^2 dy \right)^{1/2}, \quad (5.2.17)$$

et pour une fonction propre ϕ donnée définissons

$$J = \{j \mid \|\phi\|_{2,D_j} \geq e^{-\gamma/2\epsilon}\}. \quad (5.2.18)$$

Lemme 5.2.9 ([10], Lemme 4.3). *Soit ϕ est une fonction propre comme dans la Proposition 5.2.8. Si $j \in J$ alors il existe une constante c_j , une constante positive $C < \infty$ indépendante de ϵ et une constante α telles que*

$$\sup_{x \in B_{\sqrt{\epsilon}}(x_j)} |\phi(x) - c_j| \leq C\epsilon^{\alpha/2} |c_j|. \quad (5.2.19)$$

Démonstration. Même démonstration que dans [10] avec le changement $|c_j|$ à la place de c_j car dans le cas symétrique les fonctions propres ne sont pas toujours positives. □

Remarque 5.2.10. Le Corollaire 9.4 de [17] que nous avons utilisé, est une conséquence du Théorème 8.22 de [17], et en analysant la preuve on remarque que $\alpha \in]0, 1[$.

Lemme 5.2.11 ([10], Lemme 4.4). *Soit ϕ est une fonction propre comme dans la Proposition 5.2.8. Si $j \notin J$ alors il existe une constante positive $C < \infty$ indépendante de ϵ telle que*

$$\sup_{x \in B_{\sqrt{\epsilon}}(x_j)} |\phi(x)| \leq C\epsilon^{-d/4} e^{-\gamma/2\epsilon} e^{V(x_j)/2\epsilon}. \quad (5.2.20)$$

Démonstration. Par le lemme 5.2.7, on a

$$\begin{aligned} \sup_{x \in B_{\sqrt{\epsilon}}(x_j)} |\phi(x)| &\leq C\epsilon^{-d/4} \left(\int_{B_{2\sqrt{\epsilon}}(x)} \phi(y)^2 dy \right)^{1/2} \leq C'\epsilon^{-d/4} e^{V(x_i)/2\epsilon} \|\phi\|_{2,B_{2\sqrt{\epsilon}}} \\ &\leq C'\epsilon^{-d/4} e^{V(x_i)/2\epsilon} \|\phi\|_{2,D_j} = C'\epsilon^{-d/4} e^{V(x_i)/2\epsilon} \end{aligned}$$

□

Contrairement à [10] nous ne pouvons ordonner les minima du potentiel V comme dans (4.12) avec une inégalité stricte car notre potentiel peut posséder des symétries. Donc comme dans la sous-section 4.1.3 nous allons définir une hiérarchie métastable de la même manière, la seule différence est que maintenant nous sommes dans le cas continu en espace.

Définition 5.2.12. *Soit G un groupe fini d'isométries $g : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}^d$. On suppose que le potentiel V est invariant sous le groupe G c'est à dire :*

$$\forall g \in G, V \circ g = V. \quad (5.2.21)$$

Le groupe G agit naturellement sur l'ensemble \mathcal{M} des minima locaux de V , et comme nous l'avons rappelé dans la sous-section 4.1.3 les orbites d'une action forment une partition. En les notant A_1, \dots, A_{n_G} , nous pouvons donner la version continue de la hiérarchie métastable

Hypothèse 5.2.13 (Hiérarchie métastable). Soient $\mathcal{M}_k = A_1 \cup \dots \cup A_k$ pour $k \in \{1, \dots, n_G\}$. On peut ordonner les orbites de telle manière que

$$V(z^*(A_k, \mathcal{M}_{k-1})) - V(A_k) \leq \min_{i < k} V(z^*(A_i, \mathcal{M}_k \setminus A_i)) - V(A_i) - \theta, \quad k \in \{2, \dots, n_G\} \quad (5.2.22)$$

pour un certain $\theta > 0$. On notera cet ordre $A_1 \prec A_2 \prec \dots \prec A_{n_G}$.

Dans le chapitre 4, des processus de saut Markoviens, nous avons fait l'hypothèse 4.1.9 d'absence de dégénérescence accidentelle, pour simplifier l'expression des valeurs propres. Nous allons faire de même pour les processus de diffusions.

Hypothèse 5.2.14 (Absence de dégénérescence accidentelle). Chaque fois qu'il y a des éléments $x_{i_1}, x_{j_1}, x_{i_2}, x_{j_2} \in \mathcal{M}$ tels $\hat{V}(x_{i_1}, x_{j_1}) - V(x_{i_1}) = \hat{V}(x_{i_2}, x_{j_2}) - V(x_{i_2})$, il existe $g \in G$ tel $g(i_1) = i_2$ et $g(j_1) = j_2$.

Pour simplifier les écritures qui vont suivre nous allons introduire quelques notations.

Définition 5.2.15. Pour tout $x_i \in \mathcal{M}$ posons $B_i = B_\epsilon(x_i)$ et pour tout $i \in \{1, \dots, n_G\}$ posons

$$S_i = \bigcup_{j=1}^i \bigcup_{k: x_k \in A_j} B_k. \quad (5.2.23)$$

Supposons que nous voulons calculer les valeurs propres inférieures à $\bar{\lambda}(\Omega \setminus S_k)$ que l'on notera $\bar{\lambda}_k$. On sait que si ϕ^λ est une fonction propre avec $\lambda < \bar{\lambda}_k$ alors elle peut être représentée comme la solution du problème de Dirichlet

$$\begin{aligned} (L_\epsilon - \lambda)f(x) &= 0, & x \in \Omega \setminus S_k, \\ f(x) &= \phi^\lambda, & x \in \partial S_k, \end{aligned} \quad (5.2.24)$$

Donc, comme dans l'analyse des valeurs propres principales de la sous-section précédente, la condition nécessaire et suffisante pour qu'un tel λ existe est l'existence d'une fonction non triviale ϕ^λ sur ∂S_k telle que la mesure de surface

$$e^{-V(y)/\epsilon} (L_\epsilon - \lambda) f^\lambda(y) dy = e^{-V(y)/\epsilon} (\partial_{n(y)} + \partial_{-n(y)}) f^\lambda(y) d\sigma_{S_k}(y) \quad (5.2.25)$$

soit nulle. Une condition nécessaire évidente pour que cela soit vérifié est

$$\int_{\partial B_i} e^{-V(y)/\epsilon} (\partial_{n(y)} + \partial_{-n(y)}) f^\lambda(y) d\sigma_{S_k}(y) = 0 \quad (5.2.26)$$

pour tout $B_i \subset S_k$.

Du fait des Lemmes 5.2.9 et 5.2.11, en posant $c_i = \inf_{y \in B_i} \phi^\lambda(y)$ on a l'alternative :

1. Soit

$$\sup_{y \in B_i} \left| \frac{\phi^\lambda(y)}{c_i} - 1 \right| \leq C\epsilon^{\alpha/2}. \quad (5.2.27)$$

2. Soit

$$\sup_{y \in B_i} |\phi^\lambda(y)| \leq C\epsilon^{-d/4} e^{-\gamma/2\epsilon} e^{V(x_i)/2\epsilon}. \quad (5.2.28)$$

Nous allons maintenant considérer tous les cas possibles. Posons $J \subset \{1, \dots, \sum_{i=1}^k |A_i|\}$ l'ensemble des indices où (1) est vraie et donc J^c est l'ensemble des indices où (2) est vraie. Avec cette partition posons

$$f^\lambda = \sum_{j \in J} c_j (h_{B_j, S_k \setminus B_j}^\lambda + \psi^\lambda) + \sum_{j \in J^c} \psi^\lambda, \quad (5.2.29)$$

où $h_{B_j, S_k \setminus B_j}^\lambda$ sont les potentiels d'équilibre définis dans (5.1.14) et les fonctions ψ^λ satisfont les problèmes pour $j \in J$

$$\begin{aligned} (L_\epsilon - \lambda)\psi^\lambda(y) &= 0, & y \in \Omega \setminus S_k, \\ \psi^\lambda(y) &= \frac{\phi^\lambda(y)}{c_j} - 1, & y \in \partial B_j, \\ \psi^\lambda(y) &= 0, & y \in \partial S_k \setminus B_j, \end{aligned} \quad (5.2.30)$$

et pour $j \in J^c$

$$\begin{aligned} (L_\epsilon - \lambda)\psi^\lambda(y) &= 0, & y \in \Omega \setminus S_k, \\ \psi^\lambda(y) &= \phi^\lambda(y), & y \in \partial B_j, \\ \psi^\lambda(y) &= 0, & y \in \partial S_k \setminus B_j, \end{aligned} \quad (5.2.31)$$

Avec la décomposition de f^λ on peut décomposer la condition nécessaire (5.2.26) de la façon suivante

$$\begin{aligned} 0 &= \int_{\partial B_i} e^{-V(y)/\epsilon} (\partial_{n(y)} + \partial_{-n(y)}) f^\lambda(y) d\sigma_{S_k}(y) \\ &= \int_{\partial B_i} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) (\partial_{n(y)} + \partial_{-n(y)}) f^\lambda(y) d\sigma_{S_k}(y) \\ &= \int_{\partial S_k} e^{-V(y)/\epsilon} \partial_{n(y)} h_i(y) f^\lambda(y) d\sigma_{S_k}(y) - \frac{\lambda}{\epsilon} \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) f^\lambda(y) dy \\ &= \sum_{j \in J} c_j \left[\int_{\partial B_j} e^{-V(y)/\epsilon} \partial_{n(y)} h_i(y) (1 + \psi_j^\lambda(y)) d\sigma_{S_k}(y) - \frac{\lambda}{\epsilon} \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) (h_j^\lambda(y) + \psi_j^\lambda(y)) dy \right] \\ &\quad + \sum_{j \in J^c} \left[\int_{\partial B_j} e^{-V(y)/\epsilon} \partial_{n(y)} h_i(y) \psi_j^\lambda(y) d\sigma_{S_k}(y) - \frac{\lambda}{\epsilon} \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) \psi_j^\lambda(y) dy \right] \end{aligned} \quad (5.2.32)$$

Cette décomposition de la condition nécessaire motive alors la définition suivante

Définition 5.2.16. *Définissons la matrice de capacité avec pour éléments :*

$$C_{ij} = \epsilon \int_{\partial B_j} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y) \partial_{n(y)} h_i(y) d\sigma_{B_j}(y), \quad (5.2.33)$$

ainsi que sa version normalisée :

$$\mathcal{K}_{ij} = \frac{C_{ij}}{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2}, \quad (5.2.34)$$

puis les matrices auxiliaires

$$A_{ij} = \frac{\epsilon}{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2} \int_{\partial B_j} e^{-V(y)/\epsilon} \partial_{n(y)} h_i(y) \psi_j^\lambda(y) d\sigma_{\partial S_k}(y), \quad (5.2.35)$$

$$B_{ij} = \frac{1 - \delta_{ij}}{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2} \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) (h_j^\lambda(y) + \psi_j^\lambda(y)) dy, \quad j \in J, \quad (5.2.36)$$

$$B_{ij} = \frac{1 - \delta_{ij}}{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2} \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) \psi_j^\lambda(y) dy, \quad j \in J^c,$$

$$D_{ij} = \frac{\delta_{ij}}{\|h_j\|_2^2} \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) (h_j^\lambda(y) - h_j(y) + \psi_j^\lambda(y)) dy, \quad j \in J \quad (5.2.37)$$

Remarque 5.2.17. On note $\|h_i\|_2$ à la place de $\|h_i\|_{2,\Omega}$ (voir (5.2.17)) par abus de notation. Par la suite quand on écrira $\|h_i\|_2$ ce sera toujours un abus de notation pour $\|h_i\|_{2,\Omega}$.

Avec les notations de cette définition ainsi que la condition nécessaire (5.2.32) sur λ on obtient alors

Proposition 5.2.18. *Si on a pour tout $i \in J$*

$$\sum_{j \in J} \hat{c}_j (\mathcal{K}_{ij} - \lambda \delta_{ij} + A_{ij} - \lambda (D_{ij} + B_{ij})) + \sum_{j \in J^c} \|h_j\|_2 (A_{ij} - \lambda B_{ij}) = 0, \quad (5.2.38)$$

où $\hat{c}_j = \|h_j\|_2 c_j$, alors λ peut être valeur propre de L_ϵ .

Démonstration. En utilisant les notations de la définition 5.2.16, la relation (5.2.32) s'écrit

$$\begin{aligned} 0 &= \sum_{j \in J} c_j \mathcal{K}_{ij} \frac{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2}{\epsilon} + c_j A_{ij} \frac{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2}{\epsilon} - \frac{\lambda}{\epsilon} c_j (B_{ij} + D_{ij} + \delta_{ij}) \|h_i\|_2 \|h_j\|_2 \\ &+ + \sum_{j \in J^c} A_{ij} \frac{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2}{\epsilon} - \frac{\lambda}{\epsilon} B_{ij} \|h_i\|_2 \|h_j\|_2 \end{aligned}$$

En simplifiant par $\frac{\|h_i\|_2}{\epsilon}$ et en remplaçant $\|h_j\|_2 c_j$ par \hat{c}_j , on obtient le résultat voulu. \square

Pour continuer notre analyse il va nous falloir plusieurs estimations et propriétés sur ces matrices, commençons : par les matrices auxiliaires.

Lemme 5.2.19. *On a*

1. *pour tout $i \neq j$*

$$\begin{aligned} \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) h_j(y) dy &\leq C \epsilon^{-1/2} \min \left(e^{-\hat{V}(x_i, S_k \setminus B_i)/\epsilon}, e^{-\hat{V}(x_j, S_k \setminus B_j)/\epsilon} \right) \\ &\leq C \epsilon^{-d-\frac{1}{2}} \sqrt{C_{ii} C_{jj}}, \end{aligned} \quad (5.2.39)$$

2. *pour tout j*

$$\int_{\Omega} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy = e^{-V(x_j)/\epsilon} \frac{(2\pi\epsilon)^{d/2}}{\sqrt{\det(\nabla^2 V(x_j))}} (1 + \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon} |\ln \epsilon|^{3/2})). \quad (5.2.40)$$

Démonstration. 1. Soient $i \neq j$, décomposons l'intégrale de la manière suivante

$$\begin{aligned} \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) h_j(y) dy &= \int_{y \in \Omega \setminus S_k : V(y) \leq \max(\hat{V}(x_i, S_k \setminus B_j), \hat{V}(x_j, S_k \setminus B_i))} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) h_j(y) dy \\ &+ \int_{y \in \Omega \setminus S_k : V(y) > \max(\hat{V}(x_i, S_k \setminus B_j), \hat{V}(x_j, S_k \setminus B_i))} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) h_j(y) dy \end{aligned}$$

En majorant $h_i h_j \leq 1$, du fait de la relation (5.0.4), on déduit que la deuxième intégrale est majorée par $C e^{\max(\hat{V}(x_i, S_k \setminus B_j), \hat{V}(x_j, S_k \setminus B_i))}$. Pour la première intégrale, si on regarde la composante connexe ne contenant pas x_i , en faisant la majoration $h_j \leq 1$ et en utilisant le Corollaire 4.8 de [9] on a

$$e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) h_j(y) \leq C \epsilon^{-1/2} e^{-\hat{V}(x_j, S_k \setminus B_j)/\epsilon}.$$

Pour la composante connexe contenant x_i , en faisant la majoration $h_i \leq 1$ et en utilisant le Corollaire 4.8 de [9] on a

$$e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) h_j(y) \leq C \epsilon^{-1/2} e^{-\hat{V}(x_i, S_k \setminus B_j)/\epsilon}.$$

Comme

$$\int_{y \in \Omega \setminus S_k : V(y) \leq \max(\hat{V}(x_i, S_k \setminus B_j), \hat{V}(x_j, S_k \setminus B_i))} dy$$

est une constante finie ne dépendant pas de ϵ , on en déduit que

$$\begin{aligned} \int_{y \in \Omega \setminus S_k : V(y) \leq \max(\hat{V}(x_i, S_k \setminus B_j), \hat{V}(x_j, S_k \setminus B_i))} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) h_j(y) dy \\ \leq C \epsilon^{-1/2} e^{-\max(\hat{V}(x_i, S_k \setminus B_j), \hat{V}(x_j, S_k \setminus B_i))/\epsilon}. \end{aligned}$$

D'où

$$\int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) h_j(y) dy \leq C \epsilon^{-1/2} \min \left(e^{-\hat{V}(x_i, S_k \setminus B_i)/\epsilon}, e^{-\hat{V}(x_j, S_k \setminus B_j)/\epsilon} \right)$$

Comme

$$\forall x, y \in \mathbb{R}^+, \min(x, y) \leq \sqrt{xy},$$

en utilisant le Théorème 5.1 de [9] (estimation de la capacité), on obtient la deuxième inégalité voulue.

2. Soit j , décomposons l'intégrale de la manière suivante

$$\int_{\Omega} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy = \int_A e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy + \int_{A^c} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy,$$

où $A = \{y \in \Omega : V(y) \leq V(x_j) + (1 + \frac{d}{2})\epsilon |\ln \epsilon|\}$. En majorant $h_j^2 \leq 1$, du fait de la relation (5.0.4), on déduit que la deuxième intégrale est majorée par

$$C e^{-(V(x_j) + (1 + \frac{d}{2})\epsilon |\ln \epsilon|)/\epsilon} = e^{-V(x_j)/\epsilon} \epsilon^{d/2} \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon} |\ln \epsilon|^{3/2}).$$

Pour la première intégrale, si on regarde la composante connexe de A contenant x_i avec $i \neq j$, que l'on note $C(x_i, A)$, en faisant la majoration $h_j \leq 1$ et en utilisant le Corollaire 4.8 de [9] on a

$$\int_{C(x_i, A)} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy \leq C \epsilon^{-1/2} e^{-\hat{V}(x_i, B_j)} \int_{C(x_i, A)} dy.$$

Comme la fonction $x \mapsto x |\ln x|$ admet un maximum sur $]0, 1]$ en e^{-1} alors $\int_{C(x_i, A)} dy$ est majorée uniformément en ϵ par une constante, donc on a

$$\int_{C(x_i, A)} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy \leq C' \epsilon^{-1/2} e^{-\hat{V}(x_i, B_j)} = e^{-V(x_j)/\epsilon} \epsilon^{d/2} \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon} |\ln \epsilon|^{3/2}).$$

Comme x_j est un minimum local quadratique, on peut changer localement de base pour obtenir

$$V(y) = V(x_j) + \sum_{l=1}^d \frac{\lambda_l (y_l - (x_j)_l)^2}{2} + \mathcal{O}(\|y - x_j\|_2^3)$$

Alors pour la composante connexe de A contenant x_j , que l'on note $C(x_j, A)$, en faisant la majoration $h_j^2 \leq 1$ on a

$$\begin{aligned} \int_{C(x_j, A)} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy &\leq \int_{C(x_j, A)} e^{-V(x_j)/\epsilon} e^{-(\sum_{l=1}^d \frac{\lambda_l (y_l - (x_j)_l)^2}{2})/\epsilon} e^{-\mathcal{O}(\|y - x_j\|^3)/\epsilon} dy \\ &\leq e^{-V(x_j)/\epsilon} e^{C\epsilon^{1/2} |\ln \epsilon|} \int_{C(x_j, A)} e^{-(\sum_{l=1}^d \frac{\lambda_l (y_l - (x_j)_l)^2}{2})/\epsilon} dy \\ &\leq e^{-V(x_j)/\epsilon} e^{C\epsilon^{1/2} |\ln \epsilon|} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-(\sum_{l=1}^d \frac{\lambda_l y_l^2}{2})/\epsilon} dy \\ &= e^{-V(x_j)/\epsilon} \frac{(2\pi\epsilon)^{d/2}}{\sqrt{\det(\nabla^2 V(x_j))}} (1 + \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon} |\ln \epsilon|^{3/2})). \end{aligned}$$

D'où

$$\int_{\Omega} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy \leq e^{-V(x_j)/\epsilon} \frac{(2\pi\epsilon)^{d/2}}{\sqrt{\det(\nabla^2 V(x_j))}} (1 + \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon} |\ln \epsilon|^{3/2})).$$

Il nous faut maintenant montrer la borne inférieure. Comme x_j est un minimum local quadratique, on peut changer localement de base pour obtenir

$$V(y) = V(x_j) + \sum_{l=1}^d \frac{\lambda_l (y_l - (x_j)_l)^2}{2} + \mathcal{O}(\|y - x_j\|_2^3)$$

Posons

$$U_{\epsilon} = \prod_{i=1}^d \left[-\frac{\sqrt{\epsilon |\ln \epsilon|}}{\sqrt{\lambda_i}} + (x_j)_i, \frac{\sqrt{\epsilon |\ln \epsilon|}}{\sqrt{\lambda_i}} + (x_j)_i \right]$$

En utilisant le Corolaire 4.8 de [9] on a

$$\forall y \in U_\epsilon, h_j(y)^2 \geq (1 - e^{-(\hat{V}(x_j, S_k \setminus B_j) - V(y))/\epsilon})^2.$$

L'ensemble U_ϵ est maximal en $\epsilon = e^{-1}$, donc il existe $\chi > 0$ indépendant de ϵ tel que

$$\sup_{y \in U_\epsilon} h_j(y)^2 \geq (1 - e^{-\chi/\epsilon})^2.$$

Alors

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy &\geq \int_{U_\epsilon} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy \geq (1 - e^{-\chi/\epsilon})^2 \int_{U_\epsilon} e^{-V(y)/\epsilon} dy \\ &= (1 - e^{-\chi/\epsilon})^2 e^{-V(x_j)/\epsilon} e^{\mathcal{O}(\|y-x_j\|_2^3)/\epsilon} \prod_{l=1}^d \int_{-\frac{\sqrt{\epsilon|\ln \epsilon}}{\sqrt{\lambda_l}}}^{\frac{\sqrt{\epsilon|\ln \epsilon}}{\sqrt{\lambda_l}}} e^{-\lambda_l y_l^2 / 2\epsilon} dy \end{aligned}$$

En utilisant l'estimation de la fonction d'erreur de Gauss on obtient

$$\int_{\Omega} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy \geq (1 - e^{-\chi/\epsilon})^2 e^{-V(x_j)/\epsilon} e^{-C\sqrt{\epsilon}|\ln \epsilon|^{3/2}} \frac{\sqrt{2\pi\epsilon}^d}{\sqrt{\det(\nabla^2 V(x_j))}} \left(1 - \frac{\sqrt{2\epsilon}}{\sqrt{\pi|\ln \epsilon|}}\right)$$

On en déduit

$$\int_{\Omega} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy \geq e^{-V(x_j)/\epsilon} \frac{(2\pi\epsilon)^{d/2}}{\sqrt{\det(\nabla^2 V(x_j))}} (1 + \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon}|\ln \epsilon|^{3/2})).$$

□

Lemme 5.2.20. *On a :*

1. pour tout $j \in J$ et pour tout i

$$|A_{ij}| \leq C\epsilon^{\alpha/2} |\mathcal{K}_{ij}|, \quad (5.2.41)$$

2. pour tout $j \in J$

$$|D_{jj}| \leq C\epsilon^{\alpha/2}, \quad (5.2.42)$$

3. pour tout $j \in J$ et pour tout $i \neq j$

$$|B_{ij}| \leq C\epsilon^{-d-\frac{1}{2}} \sqrt{\mathcal{K}_{ii}\mathcal{K}_{jj}}, \quad (5.2.43)$$

4. pour tout $j \in J^c$ et pour tout i

$$\|h_j\|_2 |A_{ij}| \leq C e^{-\gamma/2\epsilon} |\mathcal{K}_{ij}| \quad (5.2.44)$$

5. pour tout $j \in J^c$ et pour tout $i \neq j$

$$\|h_j\|_2 |B_{ij}| \leq C\epsilon^{-d-\frac{1}{2}} e^{-\gamma/2\epsilon} \sqrt{\mathcal{K}_{ii}\mathcal{K}_{jj}} \quad (5.2.45)$$

Démonstration. Avant de commencer la démonstration de ces points, remarquons que si on pose $\delta\psi_j^\lambda = \psi_j^\lambda - \psi_j^0$, alors $\delta\psi_j^\lambda$ est solution du problème de Dirichlet

$$\begin{aligned} (L_\epsilon - \lambda)\delta\psi_j^\lambda &= \lambda\psi_j^0, \quad y \in \Omega \setminus S_k, \\ \delta\psi_j^\lambda &= 0, \quad y \in \partial S_k, \end{aligned}$$

et donc

$$\delta\psi_j^\lambda = \lambda(L_\epsilon^{S_k} - \lambda)^{-1}\psi_j^0.$$

Par le même argument, il en va de même pour $\delta h_j^\lambda = h_j^\lambda - h_j^0$. De plus

$$\|\lambda(L_\epsilon^{S_k} - \lambda)^{-1}\| \leq \frac{\lambda}{\lambda(\Omega \setminus S_k) - \lambda} = \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}).$$

1. Soient $j \in J$ et i quelconque. Par définition de ψ_j^λ on a

$$\forall y \in \partial B_j, |\psi_j^\lambda(y)| \leq C\epsilon^{\alpha/2}.$$

Alors on a

$$\begin{aligned} |A_{ij}| &\leq C\epsilon^{\alpha/2} \frac{\epsilon}{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2} \left| \int_{\partial B_j} e^{-V(y)/\epsilon} \partial_{n(y)} h_i(y) d\sigma_{\partial S_k}(y) \right| \\ &= C\epsilon^{\alpha/2} \frac{\epsilon}{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2} \left| \int_{\partial B_j} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y) \partial_{n(y)} h_i(y) d\sigma_{\partial S_k}(y) \right| \\ &= C\epsilon^{\alpha/2} \frac{|\mathcal{C}_{ij}|}{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2} = C\epsilon^{\alpha/2} |\mathcal{K}_{ij}|. \end{aligned}$$

2. Soit $j \in J$, on a

$$\begin{aligned} &\left| \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y) (h_j^\lambda(y) - h_j(y) + \psi_j^\lambda(y)) dy \right| \\ &= \left| \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y) (\lambda(L_\epsilon^{S_k} - \lambda)^{-1} h_j(y) + \psi_j^0(y) + \lambda(L_\epsilon^{S_k} - \lambda)^{-1} \psi_j^0(y)) dy \right| \\ &\leq \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}) \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y)^2 dy + (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) \left| \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y) \psi_j^0(y) dy \right|. \end{aligned}$$

En utilisant la représentation du noyau de Poisson de ψ_j^0

$$\psi_j^0(x) = -\epsilon \int_{\partial B_j} e^{-(V(y)-V(x))/\epsilon} \left(\frac{\phi^\lambda(y)}{c_j} - 1 \right) \partial_{n(y)} G_{\Omega \setminus S_k}(x, y) d\sigma_{B_j}(y),$$

ainsi que l'estimation de ϕ^λ sur ∂B_j et la représentation du noyau de Poisson de h_j on obtient

$$0 \leq \psi_j^0(x) \leq C\epsilon^{\alpha/2} h_j(x).$$

Donc on a

$$\begin{aligned} &\left| \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y) (h_j^\lambda(y) - h_j(y) + \psi_j^\lambda(y)) dy \right| \\ &\leq \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}) \|h_j\|_2^2 + \mathcal{O}(\epsilon^{\alpha/2}) (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) \|h_j\|_2^2 \end{aligned}$$

D'où, en divisant cette relation par $\|h_j\|_2^2$, on obtient

$$|D_{jj}| \leq C\epsilon^{\alpha/2}.$$

3. Soient $j \in J$ et $i \neq j$. En utilisant le même raisonnement que dans le point précédent on a

$$\begin{aligned} &\left| \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) (h_j^\lambda(y) + \psi_j^\lambda(y)) dy \right| \\ &\leq (1 + \mathcal{O}(\epsilon^{\alpha/2})) (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) h_j(y) dy \end{aligned}$$

Puis en utilisant le Lemme 5.2.19 on a

$$\begin{aligned} &\left| \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) (h_j^\lambda(y) + \psi_j^\lambda(y)) dy \right| \\ &\leq C\epsilon^{-d-\frac{1}{2}} \sqrt{\mathcal{C}_{ii} \mathcal{C}_{jj}} \end{aligned}$$

D'où, en divisant cette relation par $\|h_i\|_2 \|h_j\|_2$, on obtient

$$|B_{ij}| \leq C\epsilon^{-d-\frac{1}{2}} \sqrt{\mathcal{K}_{ii} \mathcal{K}_{jj}},$$

4. Soient $j \in J^c$ et i quelconque. Par définition de ψ_j^λ on a

$$\forall y \in \partial B_j, |\psi_j^\lambda(y)| \leq C\epsilon^{-d/4} e^{-\gamma/2\epsilon} e^{V(x_j)/2\epsilon}.$$

En utilisant le même argument que le premier point on a

$$|A_{ij}| \leq C\epsilon^{-d/4} e^{-\gamma/2\epsilon} e^{V(x_j)/2\epsilon} |\mathcal{K}_{ij}|.$$

On sait, par la relation (5.2.40), que

$$\|h_j\|_2^2 \leq C\epsilon^{d/2} e^{-V(x_j)/\epsilon},$$

alors on a

$$\|h_j\|_2 |A_{ij}| \leq C e^{-\gamma/2\epsilon} |\mathcal{K}_{ij}|.$$

5. Soient $j \in J^c$ et $i \neq j$. En utilisant le même raisonnement que dans le deuxième point, on obtient

$$\left| \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) \psi_j^\lambda(y) dy \right| \leq C\epsilon^{-d/4} e^{-\gamma/2\epsilon} e^{V(x_j)/2\epsilon} \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) h_j(y) dy.$$

En utilisant la relation (5.2.39), on a

$$\left| \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) \psi_j^\lambda(y) dy \right| \leq C\epsilon^{-d/4} e^{-\gamma/2\epsilon} e^{V(x_j)/2\epsilon} \epsilon^{-d-\frac{1}{2}} \sqrt{\mathcal{C}_{ii}\mathcal{C}_{jj}},$$

d'où, en divisant cette relation par $\|h_j\|_2^2$, on obtient

$$|B_{ij}| \leq C\epsilon^{-d/4} e^{-\gamma/2\epsilon} e^{V(x_j)/2\epsilon} \epsilon^{-d-\frac{1}{2}} \sqrt{\mathcal{K}_{ii}\mathcal{K}_{jj}}.$$

On sait, par la relation (5.2.40), que

$$\|h_j\|_2^2 \leq C\epsilon^{d/2} e^{-V(x_j)/\epsilon},$$

alors on a

$$\|h_j\|_2 |B_{ij}| \leq C e^{-\gamma/2\epsilon} \epsilon^{-d-\frac{1}{2}} \sqrt{\mathcal{K}_{ii}\mathcal{K}_{jj}}.$$

□

Puis les deux matrices de capacité

Proposition 5.2.21. *Les matrices \mathcal{C} et \mathcal{K} sont symétriques et vérifient :*

1. pour tout i et j

$$\mathcal{C}_{ij} = \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} \epsilon \langle \nabla h_i(y), \nabla h_j(y) \rangle dy, \quad (5.2.46)$$

2. pour tout i et j

$$|\mathcal{K}_{ij}| \leq \sqrt{\mathcal{K}_{ii}\mathcal{K}_{jj}}, \quad (5.2.47)$$

3. pour tout i

$$\sum_j \mathcal{C}_{ij} = 0. \quad (5.2.48)$$

Démonstration. 1. Comme $h_j(y) = 0$ pour tout $y \in S_k \setminus B_j$ alors

$$\mathcal{C}_{ij} = \epsilon \int_{\partial S_k} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y) \partial_{n(y)} h_i(y) d\sigma_{S_k}(y).$$

Pour pouvoir utiliser la première formule de Green, comme $n(y)$ est le vecteur normal extérieur, il faut passer au complémentaire pour avoir le vecteur normal intérieur

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_{ij} &= \epsilon \int_{\partial S_k^c} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y) \partial_{-n(y)} h_i(y) d\sigma_{S_k^c}(y) \\ &= \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} (\epsilon \langle \nabla h_i(y), \nabla h_j(y) \rangle - h_j(y) L_\epsilon h_i(y)) dy. \end{aligned}$$

Comme $L_\epsilon h_i(y) = 0$ pour tout $y \in \Omega \setminus S_k$, on obtient le résultat voulu.

2. En utilisant l'inégalité de Cauchy-Schwarz, on a

$$\begin{aligned} |\mathcal{C}_{ij}| &= \left| \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} \epsilon \langle \nabla h_i(y), \nabla h_j(y) \rangle dy \right| \leq \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} \epsilon |\langle \nabla h_i(y), \nabla h_j(y) \rangle| dy \\ &\leq \left(\int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} \epsilon \langle \nabla h_i(y), \nabla h_i(y) \rangle dy \right)^{1/2} \left(\int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} \epsilon \langle \nabla h_j(y), \nabla h_j(y) \rangle dy \right)^{1/2} \\ &= \sqrt{\mathcal{C}_{ii} \mathcal{C}_{jj}}. \end{aligned}$$

D'où

$$|\mathcal{K}_{ij}| = \frac{|\mathcal{C}_{ij}|}{\|h_i\| \|h_j\|} \leq \frac{\sqrt{\mathcal{C}_{ii} \mathcal{C}_{jj}}}{\sqrt{\|h_i\|^2 \|h_j\|^2}} = \sqrt{\mathcal{K}_{ii} \mathcal{K}_{jj}}$$

3. En utilisant le point précédent, la linéarité de l'intégrale et du gradient, on a

$$\sum_j \mathcal{C}_{ij} = \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} \epsilon \langle \nabla h_i(y), \nabla \left(\sum_j h_j \right)(y) \rangle dy.$$

Du fait de l'interprétation probabiliste des potentiels d'équilibre (5.1.22), on sait que

$$h_j(y) = \mathbb{P}^y[\tau_{B_j} < \tau_{S_k \setminus B_j}].$$

Donc en faisant la somme sur tous les j , on a pour tout $y \in \Omega$

$$\sum_j h_j(y) = 1,$$

d'où

$$\nabla \left(\sum_j h_j \right)(y) = 0.$$

Alors

$$\sum_j \mathcal{C}_{ij} = \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} \epsilon \langle \nabla h_i(y), 0 \rangle dy = 0,$$

ce qu'il fallait démontrer. □

En regroupant tous ces résultats on obtient

Théorème 5.2.22. *Soit S_k défini comme dans (5.2.23) et soit $\bar{\lambda}_k$ la valeur propre principale de l'opérateur L_ϵ . Alors un nombre $\lambda < \bar{\lambda}_k$ peut être une valeur propre de l'opérateur L_ϵ s'il existe un ensemble non vide J et des constantes \hat{c}_j telles que $\sum_{j \in J} \hat{c}_j^2 = 1$ et tel que pour tout $i \in J$ la relation (5.2.38) soit vérifiée.*

On s'attend à ce que les valeurs propres du générateur L_ϵ soient proches des valeurs propres de la matrice \mathcal{K} . Vu que nous sommes dans le cas où il peut y avoir des symétries, nous ne pouvons pas le montrer comme dans [10]. Pour l'instant, nous allons donner quelques propriétés, sur les potentiels d'équilibre h_j ainsi que sur les matrices de capacité, dues aux symétries dans le cas général de plusieurs orbites. Puis nous étudierons le cas d'une orbite dans la section suivante avant de finir par le cas de plusieurs orbites.

Lemme 5.2.23. *Pour tout $g \in G$ on a*

$$\forall x \in \mathbb{R}^d, \nabla V(g(x)) = g(\nabla V(x)). \quad (5.2.49)$$

Démonstration. Soit $x \in \mathbb{R}^d$. Comme $V(g(x)) = V(x)$, en utilisant la formule des dérivées partielles composées, on obtient

$$\frac{\partial V \circ g}{\partial x_i}(x) = \sum_{k=1}^d \frac{\partial V}{\partial x_k}(g(x)) \frac{\partial g_k}{\partial x_i}(x) = \sum_{k=1}^d \frac{\partial V}{\partial x_k}(x) \frac{\partial g_k}{\partial x_i}(x) = g_i(\nabla V(x)),$$

où g_k est la k -ième fonction composante de g , ce qu'il fallait démontrer. \square

Proposition 5.2.24. $X_t^{g(x_0)}$ et $X_t^{x_0}$ ont la même loi.

Démonstration. $X_t^{g(x_0)}$ vérifie l'équation

$$X_t^{g(x_0)} = g(x_0) + \int_0^t V(X_u^{g(x_0)}) du + \int_0^t \sqrt{2\epsilon} dB_u.$$

De même, $X_t^{x_0}$ vérifie l'équation

$$X_t^{x_0} = x_0 + \int_0^t V(X_u^{x_0}) du + \int_0^t \sqrt{2\epsilon} dB_u.$$

Comme g est une isométrie linéaire, alors

$$g(X_t^{x_0}) = g(x_0) + \int_0^t g(V(X_u^{x_0})) du + \int_0^t \sqrt{2\epsilon} dg B_u.$$

On sait que les isométries linéaires sont des invariants du mouvement Brownien, et en utilisant le lemme 5.2.23, on a

$$g(X_t^{x_0}) = g(x_0) + \int_0^t V(g(X_u^{x_0})) du + \int_0^t \sqrt{2\epsilon} dB_u,$$

d'où le résultat. \square

Corollaire 5.2.25. *Pour tous sous-ensembles $A, B \subset \mathbb{R}^d$, pour tout $x_0 \in \mathbb{R}^d$ et pour tout $g \in G$ on a*

$$\mathbb{P}^{x_0} [\tau_A < \tau_B] = \mathbb{P}^{g(x_0)} [\tau_{g(A)} < \tau_{g(B)}]. \quad (5.2.50)$$

Démonstration. Par la proposition 5.2.24, $X_t^{g(x_0)}$ et $X_t^{x_0}$ ont la même loi, on en déduit donc le résultat. \square

Corollaire 5.2.26. *Soient $g \in G$ et $i \in \{1, \dots, \sum_{i=1}^k |A_i|\}$. Posons $j = g(i)$, alors on a*

$$\forall y \in \mathbb{R}^d, h_i(y) = h_j(g(y)). \quad (5.2.51)$$

De plus

$$\|h_i\|_2 = \|h_j\|_2 \quad (5.2.52)$$

Démonstration. Soient $g \in G$ et $i \in \{1, \dots, \sum_{i=1}^k |A_i|\}$. Posons $j = g(i)$. Du fait de l'interprétation probabiliste des potentiels d'équilibre (5.1.22), on sait que

$$h_i(y) = \mathbb{P}^y[\tau_{B_i} < \tau_{S_k \setminus B_i}].$$

Par le corollaire 5.2.25, on en déduit que

$$h_i(y) = \mathbb{P}^{g(y)}[\tau_{g(B_i)} < \tau_{g(S_k \setminus B_i)}].$$

Comme $g(B_i) = B_j$ et $g(S_k \setminus B_i) = S_k \setminus B_j$, alors

$$h_i(y) = \mathbb{P}^{g(y)}[\tau_{B_j} < \tau_{S_k \setminus B_j}] = h_j(g(y)),$$

d'où la première relation. Par un changement de variable, on a

$$\|h_j\|_2^2 = \int_{\Omega} |\det J_g(z)| e^{-V(g(z))/\epsilon} h_j(g(z))^2 dz$$

Toutes les valeurs propres d'une isométrie linéaire sont de module 1, alors $|\det J_g(z)| = 1$. Comme $V(g(y)) = V(y)$ et $h_i(z) = h_j(g(z))$ alors

$$\|h_j\|_2^2 = \int_{\Omega} e^{-V(z)/\epsilon} h_i(z)^2 dz = \|h_i\|_2^2,$$

d'où la deuxième relation relation. □

Proposition 5.2.27. *Pour tout $g \in G$ et pour tout i, j on a*

$$\mathcal{C}_{ij} = \mathcal{C}_{g(i)g(j)}, \quad (5.2.53)$$

$$\mathcal{K}_{ij} = \mathcal{K}_{g(i)g(j)}. \quad (5.2.54)$$

Démonstration. Soient i, j et $g \in G$. Par la relation (5.2.46) on a

$$\mathcal{C}_{g(i)g(j)} = \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} \epsilon \langle \nabla h_{g(i)}(y), \nabla h_{g(j)}(y) \rangle dy.$$

Par le corollaire 5.2.26, on a

$$\mathcal{C}_{g(i)g(j)} = \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(y)/\epsilon} \epsilon \langle \nabla(h_i \circ g^{-1})(y), \nabla(h_j \circ g^{-1})(y) \rangle dy.$$

En faisant un changement de variable, on obtient

$$\mathcal{C}_{g(i)g(j)} = \int_{\Omega \setminus S_k} |\det J_g(z)| e^{-V(g(z))/\epsilon} \epsilon \langle \nabla(h_i \circ g^{-1})(g(z)), \nabla(h_j \circ g^{-1})(g(z)) \rangle dz.$$

Toutes les valeurs propres d'une isométrie linéaire sont de module 1, alors $|\det J_g(z)| = 1$. En utilisant la formule des dérivées partielles composées, on a

$$\langle \nabla(h_i \circ g^{-1})(g(z)), \nabla(h_j \circ g^{-1})(g(z)) \rangle = \sum_{\alpha, \beta=1}^d \frac{\partial h_i}{\partial x_{\alpha}}(z) \frac{\partial h_j}{\partial x_{\beta}}(z) \sum_{k=1}^d \frac{\partial g_{\alpha}^{-1}}{\partial x_k}(z) \frac{\partial g_{\beta}^{-1}}{\partial x_k}(z).$$

Comme g est une isométrie linéaire, alors g^{-1} l'est aussi. La matrice jacobienne d'une isométrie linéaire est en fait sa matrice représentative dans la base canonique, de plus on sait que les lignes (et aussi les colonnes) forment une base orthonormale de \mathbb{R}^d , d'où

$$\sum_{k=1}^d \frac{\partial g_{\alpha}^{-1}}{\partial x_k}(z) \frac{\partial g_{\beta}^{-1}}{\partial x_k}(z) = \delta_{\alpha\beta}.$$

Alors

$$\langle \nabla(h_i \circ g^{-1})(g(z)), \nabla(h_j \circ g^{-1})(g(z)) \rangle = \sum_{\alpha=1}^d \frac{\partial h_i}{\partial x_{\alpha}}(z) \frac{\partial h_j}{\partial x_{\alpha}}(z) = \langle \nabla h_i(z), \nabla h_j(z) \rangle.$$

Comme $V(g(z)) = V(z)$, on en déduit

$$\mathcal{C}_{g(i)g(j)} = \int_{\Omega \setminus S_k} e^{-V(z)/\epsilon} \epsilon \langle \nabla h_i(z), \nabla h_j(z) \rangle dz = \mathcal{C}_{ij},$$

d'où la première relation. En utilisant le Corollaire 5.2.26 et la relation que l'on vient de montrer, on a

$$\mathcal{K}_{g(i)g(j)} = \frac{\mathcal{C}_{g(i)g(j)}}{\|h_{g(i)}\|_2 \|h_{g(j)}\|_2} = \frac{\mathcal{C}_{ij}}{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2} = \mathcal{K}_{ij},$$

d'où la deuxième relation. □

5.3 Cas d'une orbite

Nous allons considérer le cas d'une orbite, c'est à dire si on note $1, \dots, n$ les minima locaux de V , on a

$$\forall i, j \in \{1, \dots, n\}, \exists g \in G, g(i) = j. \quad (5.3.1)$$

Pour étudier ce cas, et montrer que les valeurs propres du générateur L_ϵ sont proches de celles de la matrice \mathcal{K} , nous allons devoir étudier précisément la structure de la matrice \mathcal{K} . Nous allons voir qu'elle est de la même forme que la matrice L du chapitre 4 définie dans (4.1.1), et donc pouvoir utiliser le fait que nous connaissons les valeurs propres de cette matrice ainsi que ses vecteurs propres (avec un terme d'erreur exponentiellement petit), afin d'obtenir le résultat sur les valeurs propres.

Commençons d'abord par l'étude des coefficients diagonaux

Proposition 5.3.1. *Pour tout $i, j \in \{1, \dots, n\}$ on a*

$$\mathcal{C}_{ii} = \mathcal{C}_{jj}, \quad (5.3.2)$$

$$\mathcal{K}_{ii} = \mathcal{K}_{jj}. \quad (5.3.3)$$

Démonstration. Soient $i, j \in \{1, \dots, n\}$. Comme on est dans le cas d'une orbite, alors il existe $g \in G$ tel que $j = g(i)$. En utilisant la Proposition 5.2.27, dans le cas $i = j$, on obtient le résultat voulu. \square

Pour étudier les coefficients hors diagonaux, une approche possible serait d'utiliser le corollaire 4.8 de [9], mais on obtiendrait un terme d'erreur en $\sqrt{\epsilon} |\ln(\epsilon)|^{3/2}$. Comme nous avons des termes qui sont exponentiellement petits, ce terme d'erreur n'est pas suffisant.

Nous allons donc utiliser la définition 1.2.5 de minima voisins définie dans l'introduction que nous rappelons ainsi qu'une estimation de type Bernstein, pour avoir un meilleur terme d'erreur pour certains coefficients hors diagonaux.

Définition 5.3.2. *On appelle bassin d'attraction de $x_i \in \mathcal{M}$, que l'on notera D_i , l'ensemble des points $y \in \Omega$ tels que la solution de l'équation différentielle $dX(t) = -\nabla V(X(t))dt$, avec pour condition initiale $X(0) = y$, converge vers x_i .*

Soient x_i et x_j deux minima locaux de V . On dira qu'il sont voisins s'il existe un chemin $\omega : [0, 1] \rightarrow \Omega$ tel que $\omega(0) = x_i$, $\omega(1) = x_j$ et

$$\text{im } \omega \setminus ((\text{im } \omega \cap D_i) \cup (\text{im } \omega \cap D_j)) \text{ est réduit à un point,} \quad (5.3.4)$$

où $\text{im } \omega$ est l'ensemble image de la fonction ω .

Lemme 5.3.3 ([33], Théorème 37.8). *Considérons la martingale*

$$M_t = \int_0^t g(X_s, s) dW_s, \quad (5.3.5)$$

où X_s est adapté à la filtration engendrée par W_s . Supposons

$$g(X_s, s)^t g(X_s, s) \leq G(s)^2 \quad (5.3.6)$$

presque partout, et que

$$V(t) = \int_0^t G(s)^2 < \infty. \quad (5.3.7)$$

Alors on a

$$\mathbb{P}\left\{ \sup_{0 \leq s \leq t} M_s > L \right\} \leq e^{-L^2/2V(t)} \quad (5.3.8)$$

pour tout $L > 0$.

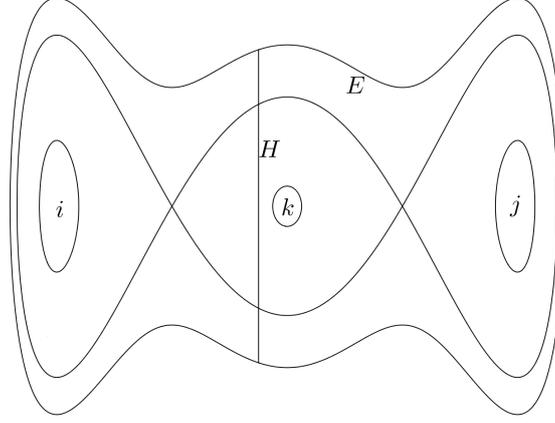
Donnons maintenant le lemme permettant de contrôler les coefficients hors diagonaux pour des non voisins.

Lemme 5.3.4. *Soient $i, j \in \{1, \dots, n\}$ non voisins alors il existe $\delta > 0$ tel que*

$$|\mathcal{C}_{ij}| \leq e^{-\delta/\epsilon} \mathcal{C}_{ii}, \quad (5.3.9)$$

$$|\mathcal{K}_{ij}| \leq e^{-\delta/\epsilon} \mathcal{K}_{ii}. \quad (5.3.10)$$

Démonstration. Commençons cette démonstration dans un cas simple, la généralisation découlant directement de ce cas. Considérons le potentiel suivant, représenté par ses lignes de niveau.



La ligne de niveau E a une hauteur de potentiel supérieure à la ligne de niveau associée aux selles. La partie d'hyperplan H est définie telle que la hauteur de potentiel de chaque élément de H est inférieure à la hauteur de potentiel de E et telle que chaque élément de H est dans le bassin d'attraction de x_k .

Ici i et j sont non voisins. Rappelons les expressions que l'on veut contrôler

$$\mathcal{C}_{ij} = \int_{\partial B_i} \epsilon e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) \partial_{n(y)} h_j(y) d\sigma_{B_i}(y)$$

$$\mathcal{C}_{ii} = \int_{\partial B_i} \epsilon e^{-V(y)/\epsilon} h_i(y) \partial_{n(y)} h_i(y) d\sigma_{B_i}(y)$$

Une condition suffisante pour la relation (5.3.9) est

$$|\partial_{n(y)} h_j(y)| \leq e^{-\delta/\epsilon} \partial_{n(y)} h_i(y),$$

où

$$\partial_{n(y)} h_j(y) = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} -\frac{h_j(\alpha n(x) + x)}{\alpha},$$

$$\partial_{n(y)} h_i(y) = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} -\frac{h_i(\alpha n(x) + x) - 1}{\alpha},$$

pour tout $y \in \partial B_i$. Alors, par conservation des inégalités par passage à limite, une condition suffisante pour la relation (5.3.9) est

$$|h_j(x)| \leq e^{-\delta/\epsilon} (1 - h_i(x)), \quad (5.3.11)$$

pour tout x proche de B_i . Pour aller de i à j , si l'on reste à l'intérieur de E , on doit obligatoirement toucher H .

Nous allons montrer, à l'aide du Lemme 5.3.3, que pour tout $x \in H$ on a une très forte probabilité de toucher B_k avant les autres minima. Soit $x_0^0 \in H$, si on regarde la trajectoire déterministe

$$dx_t^0 = -\nabla V(x_t^0) dt,$$

on sait qu'il existe $T < \infty$ tel que $x_T^0 \in B_\rho(x_k)$, pour $\rho > 0$ petit fixé, car H est dans le bassin d'attraction de x_k . Considérons maintenant la trajectoire avec le bruit

$$dx_t = -\nabla V(x_t)dt + \sqrt{2\epsilon}dW_t,$$

avec la condition initiale $x_0 = x_0^0$ et posons $y_t = x_t - x_t^0$. On a

$$dy_t = F(y_t, t)dt + \sqrt{2\epsilon}dW_t,$$

où

$$F(y_t, t) = -[\nabla V(x_t^0 + y_t) - \nabla V(x_t^0)].$$

Posons

$$\begin{aligned} A(t) &= -HV(x_t^0), \\ b(y_t, t) &= F(y_t, t) - A(t), \end{aligned}$$

où $HV(x_t^0)$ est la matrice hessienne de V en x_t^0 . Alors

$$dy_t = A(t)dt + b(y_t, t)dt + \sqrt{2\epsilon}dW_t.$$

Remarquons qu'en faisant un développement limité on a $b(y_t, t) = \mathcal{O}(\|y_t\|^2)$. Pour des équations différentielles de la forme $\dot{y} = A(t)y$, on sait qu'il existe une application $\mathcal{U} : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d$, telle que $y_t = \mathcal{U}(t)K$ et qui vérifie $\frac{d\mathcal{U}}{dt}(t) = A(t)\mathcal{U}(t)$, appelée solution fondamentale (ou principale dans le cas $\mathcal{U}(0) = \mathbf{1}$ et $K = y_0$). De plus, comme $T < \infty$ est fixé, $\|\mathcal{U}(t)\| < \infty$ et $\|\mathcal{U}^{-1}(t)\| < \infty$ pour tout $t \in [0, T]$. En faisant la méthode de la variation de la constante on a

$$K(t) = \int_0^t \mathcal{U}^{-1}(s)b(y_s, s)ds + \int_0^t \sqrt{2\epsilon}\mathcal{U}^{-1}(s)dW_s.$$

Donc on peut décomposer

$$y_t = y_t^0 + y_t^1,$$

où

$$\begin{aligned} y_t^0 &= \int_0^t \sqrt{2\epsilon}\mathcal{U}(t, s)dW_s, \\ y_t^1 &= \int_0^t \mathcal{U}(t, s)b(y_s, s)ds, \\ \mathcal{U}(t, s) &= \mathcal{U}(t)\mathcal{U}^{-1}(s). \end{aligned}$$

En posant $g_i(x_s, s) = \sqrt{2\epsilon}\mathcal{U}_i^{-1}(s)$, on peut trouver une constante $C \in]0, \infty[$ dépendant uniquement de $\|\mathcal{U}^{-1}(t)\|$ telle que si on pose $G_i(s)^2 = C\epsilon$, la condition (5.3.6) est vérifiée. De plus $V_i(t) = Ct\epsilon$. On peut donc appliquer le Lemme 5.3.3, qui fournit

$$\begin{aligned} \mathbb{P} \left(\sup_{t \in [0, T]} \|y_t^0\| > L \right) &\leq \mathbb{P} \left(\sup_{t \in [0, T]} \left\| \int_0^t \sqrt{2\epsilon}\mathcal{U}^{-1}(s)dW_s \right\| > \frac{L}{\sup_{t \in [0, T]} \|\mathcal{U}(t)\|} \right) \\ &\leq e^{-\chi L^2/\epsilon}, \end{aligned}$$

pour une constante $\chi > 0$ qui ne dépend que de $\sup_{t \in [0, T]} \|\mathcal{U}^{-1}(t)\|$ et $\sup_{t \in [0, T]} \|\mathcal{U}(t)\|$. Posons

$$\tau = \inf\{t > 0 \mid \|y_t\| > L\}.$$

Comme $b(y_t, t) = \mathcal{O}(\|y_t\|^2)$, il existe une constante $M \in]0, \infty[$ dépendant uniquement de $\|\mathcal{U}(t)\|$, $\|\mathcal{U}^{-1}(t)\|$ et b telle que

$$\|y_{t \wedge \tau}^1\| \leq \int_0^{t \wedge \tau} \|\mathcal{U}(t, s)\| \|b(y_s, s)\| ds \leq ML^2T$$

Du fait de la continuité des trajectoires on a

$$\mathbb{P}\left(\sup_{t \in [0, T]} \|y_t\| \geq L\right) = \mathbb{P}\left(\sup_{t \in [0, T \wedge \tau]} \|y_t\| \geq L\right).$$

Alors

$$\begin{aligned} \mathbb{P}\left(\sup_{t \in [0, T]} \|y_t\| \geq L\right) &\leq \mathbb{P}\left(\sup_{t \in [0, T]} \|y_t^0\| + \sup_{t \in [0, T \wedge \tau]} \|y_t^1\| \geq L\right) \\ &\leq \mathbb{P}\left(\sup_{t \in [0, T]} \|y_t^0\| \geq L(1 - M L T)\right). \end{aligned}$$

En prenant $L < \frac{1}{2MT}$, on obtient

$$\mathbb{P}\left(\sup_{t \in [0, T]} \|y_t\| \geq L\right) \leq e^{-\chi L^2/4\epsilon}.$$

D'où

$$\mathbb{P}^{x_0^0}(x_T \in B_L(x_k)) \geq 1 - e^{-\chi L^2/4\epsilon}.$$

De plus, par le Corollaire 4.8 de [9], il existe δ' tel que

$$\mathbb{P}^{x_T}(\tau_{B_k} < \tau_{B_i \cup B_j}) \geq 1 - \frac{C}{\sqrt{\epsilon}} e^{-\delta'/\epsilon}.$$

On obtient alors qu'il existe δ tel que

$$\mathbb{P}^{x_0^0}(\tau_{B_k} < \tau_{B_i \cup B_j}) \geq 1 - \frac{C}{\sqrt{\epsilon}} e^{-\delta/\epsilon}.$$

Pour montrer la condition suffisante il va nous falloir quelques estimations sur les fonctions h_j et h_k .

1. On a

$$\{\tau_{B_k} < \tau_{B_i \cup B_j} < \tau_E\} = \{\tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E\} \setminus \{\tau_{B_j} < \tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E\}.$$

Donc

$$h_k(x) = \mathbb{P}^x(\tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E) - \mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E) + \mathbb{P}^x(\tau_{B_k} < \tau_{B_i \cup B_j}, \tau_{B_i \cup B_j} > \tau_E). \quad (5.3.12)$$

2. Pour atteindre B_j , en restant dans E , on doit forcément passer par H donc

$$\begin{aligned} \mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_i} < \tau_{B_k} < \tau_E) &= \mathbb{P}^x(\tau_H < \tau_{B_j} < \tau_{B_i} < \tau_{B_k} < \tau_E) \\ &\leq \mathbb{E}^x[\mathbf{1}_{\tau_H < \tau_{B_j} < \tau_{B_i} < \tau_{B_k} < \tau_E} \mathbb{P}^{x_{\tau_H}}(\tau_{B_j} < \tau_{B_k})] \\ &\leq \sup_{y \in H} \mathbb{P}^y(\tau_{B_j} < \tau_{B_k}) \mathbb{E}^x[\mathbf{1}_{\tau_H < \tau_{B_i} < \tau_E}] \end{aligned}$$

Avec ce qu'on fait précédemment, à l'aide du Lemme 5.3.3 et du Corollaire 4.8 de [9], on a

$$\sup_{y \in H} \mathbb{P}^y(\tau_{B_j} < \tau_{B_k}) \leq e^{-\delta/\epsilon}.$$

D'où

$$\mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_i} < \tau_{B_k} < \tau_E) \leq e^{-\delta/\epsilon} \mathbb{P}^x(\tau_H < \tau_{B_i} < \tau_E). \quad (5.3.13)$$

3. Par le même raisonnement que dans le point précédent, on obtient

$$\mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E) \leq e^{-\delta/\epsilon} \mathbb{P}^x(\tau_H < \tau_{B_i} < \tau_E). \quad (5.3.14)$$

4. Par le même raisonnement que dans le deuxième point, on obtient

$$\begin{aligned}
 \mathbb{P}^x(\tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E) &= \mathbb{P}^x(\tau_H < \tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E) \\
 &= \mathbb{P}^x(\tau_H < \tau_{B_i} < \tau_E) - \mathbb{P}^x(\tau_H < \tau_{B_i} < \tau_{B_k} < \tau_E) \\
 &\geq \mathbb{P}^x(\tau_H < \tau_{B_i} < \tau_E) - \mathbb{P}^x(\tau_H < \tau_{B_i} < \tau_E) e^{-\delta/\epsilon} \\
 &= \mathbb{P}^x(\tau_H < \tau_{B_i} < \tau_E)(1 - e^{-\delta/\epsilon})
 \end{aligned} \tag{5.3.15}$$

Nous allons combiner ces relations. On a par le Corollaire 4.8 de [9]

$$\begin{aligned}
 h_j(x) &= \mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_i \cup B_k}) = \mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_i} < \tau_{B_k}) + \mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_k} < \tau_{B_i}) \\
 &\leq \mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_i} < \tau_{B_k} < \tau_E) + \mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E) + e^{-\delta'/\epsilon}.
 \end{aligned}$$

En utilisant la relation (5.3.12), on a

$$\begin{aligned}
 h_j(x) &\leq \mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_i} < \tau_{B_k} < \tau_E) + \mathbb{P}^x(\tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E) - h_k(x) + \mathbb{P}^x(\tau_{B_k} < \tau_{B_i \cup B_j}, \tau_{B_i \cup B_j} > \tau_E) + e^{-\delta'/\epsilon} \\
 &\leq \mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_i} < \tau_{B_k} < \tau_E) + \mathbb{P}^x(\tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E) - h_k(x) + \mathbb{P}^x(\tau_{B_k} < \tau_{B_i \cup B_j}) + e^{-\delta'/\epsilon}.
 \end{aligned}$$

En utilisant de nouveau le Corollaire 4.8 de [9] on a

$$h_j(x) \leq \mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_i} < \tau_{B_k} < \tau_E) + \mathbb{P}^x(\tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E) - h_k(x) + e^{-\delta''/\epsilon}.$$

En utilisant les relations (5.3.13) et (5.3.15), on a

$$h_j(x) \leq \frac{e^{-\delta/\epsilon}}{1 - e^{-\delta/\epsilon}} \mathbb{P}^x(\tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E) + \mathbb{P}^x(\tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E) - h_k(x) + e^{-\delta''/\epsilon}.$$

En utilisant les relations (5.3.14) et (5.3.15), on a

$$\mathbb{P}^x(\tau_{B_j} < \tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E) \leq \frac{e^{-\delta/\epsilon}}{1 - e^{-\delta/\epsilon}} \mathbb{P}^x(\tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E).$$

En injectant cela dans la relation (5.3.12), on a

$$h_k(x) \geq \left(1 - \frac{e^{-\delta/\epsilon}}{1 - e^{-\delta/\epsilon}}\right)^{-1} \mathbb{P}^x(\tau_{B_k} < \tau_{B_i} < \tau_E).$$

D'où

$$h_j(x) \leq \left(1 - \frac{e^{-\delta/\epsilon}}{1 - e^{-\delta/\epsilon}}\right)^{-1} \frac{2e^{-\delta/\epsilon}}{1 - e^{-\delta/\epsilon}} h_k(x) + e^{-\delta''/\epsilon} = e^{-\delta'''/\epsilon} h_k(x).$$

Par la démonstration du troisième point de la Proposition 5.2.21, on a

$$h_i(x) + h_j(x) + h_k(x) = 1.$$

D'où

$$h_j(x) \leq e^{-\delta'''/\epsilon} h_k(x) \leq e^{-\delta'''/\epsilon} (h_k(x) + h_j(x)) = e^{-\delta'''/\epsilon} (1 - h_i(x)),$$

donc la condition suffisante est vérifiée et prouve la relation (5.3.9) dans le cas particulier de ce potentiel. La relation (5.3.10) s'obtient trivialement de (5.3.9), en utilisant le Corollaire 5.2.26

$$|\mathcal{K}_{ij}| = \frac{|\mathcal{C}_{ij}|}{\|h_i\| \|h_j\|} = \frac{|\mathcal{C}_{ij}|}{\|h_i\|^2} \leq \frac{e^{-\delta'/\epsilon} \mathcal{C}_{ii}}{\|h_i\|^2} = e^{-\delta'/\epsilon} \mathcal{K}_{ii}.$$

Pour la généralisation il faut voir qu'il peut y avoir plusieurs chemins possibles. Donc on note k_1, \dots, k_l les sites voisins de i permettant d'aller vers j , on se fixe encore un ensemble E , des parties d'hyperplans H_1, \dots, H_l et il faut démontrer

$$h_j \leq e^{-\delta/\epsilon} \sum_{s=1}^l h_{k_s}. \tag{5.3.16}$$

□

Pour les autres coefficients hors diagonaux, remarquons d'abord que l'on a la même estimation pour les voisins dont la hauteur de selle n'est pas optimale.

Proposition 5.3.5. *Soient i et j voisins tels que $\hat{V}(B_i, B_j) > \hat{V}(B_i, S_k \setminus B_i)$. Alors il existe $\delta > 0$ tel que*

$$|\mathcal{C}_{ij}| \leq \mathcal{C}_{ii} e^{-\delta/\epsilon}. \quad (5.3.17)$$

Démonstration. Soient i et j voisins tels que $\hat{V}(B_i, B_j) > \hat{V}(B_i, S_k \setminus B_i)$. Rappelons que

$$\mathcal{C}_{ij} = \epsilon \int_{\partial B_j} e^{-V(y)/\epsilon} h_j(y) \partial_{n(y)} h_i(y) dy.$$

Pour tout y proche du bord ∂B_j , par le Corollaire 4.8 de [9] on a

$$h_i(y) \leq \frac{c}{\sqrt{\epsilon}} e^{-(\hat{V}(B_j, B_i) - V(y))/\epsilon}.$$

Par conservation des inégalités par passage à la limite on a

$$|\partial_{n(y)} h_i(y)| \leq \frac{C}{\sqrt{\epsilon}} e^{-(\hat{V}(B_j, B_i) - V(y))/\epsilon} \frac{|\partial_{n(y)} V(y)|}{\epsilon}.$$

On en déduit alors que

$$|\mathcal{C}_{ij}| \leq \frac{C}{\sqrt{\epsilon}} e^{-\hat{V}(B_j, B_i)/\epsilon} \int_{\partial B_j} |\partial_{n(y)} V(y)| dy$$

Du fait de l'estimation de la capacité (Théorème 5.1 de [9]) on a

$$\mathcal{C}_{ii} = C e^{-\hat{V}(B_i, S_k \setminus B_i)/\epsilon} e^{d/2} (1 + \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon |\ln \epsilon|^3})),$$

et comme $\hat{V}(B_i, B_j) > \hat{V}(B_i, S_k \setminus B_i)$ alors il existe $\delta > 0$ indépendant de ϵ tel que

$$|\mathcal{C}_{ij}| \leq \mathcal{C}_{ii} e^{-\delta/\epsilon}. \quad (5.3.18)$$

□

Nous pouvons alors conclure quant à l'expression des autres coefficients hors diagonaux.

Proposition 5.3.6. *Soient i et j voisins tels que $\hat{V}(B_i, B_j) = \hat{V}(B_i, S_k \setminus B_i)$ alors on a*

$$\mathcal{C}_{ij} = -\frac{|G_i \cap G_j|}{|G_i|} \mathcal{C}_{ii} (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})), \quad (5.3.19)$$

$$\mathcal{K}_{ij} = -\frac{|G_i \cap G_j|}{|G_i|} \mathcal{K}_{ii} (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})), \quad (5.3.20)$$

où

$$G_i = \{g \in G \mid g(i) = i\} \quad (5.3.21)$$

est le stabilisateur de i (Définition 4.1.7).

Démonstration. Soient i et j voisins tels que $\hat{V}(B_i, B_j) = \hat{V}(B_i, S_k \setminus B_i)$. On sait, par la relation (5.2.48), que

$$\sum_{l=1}^n \mathcal{C}_{il} = 0.$$

En décomposant cette somme sur les k voisins et non voisins, on a

$$\mathcal{C}_{ii} + \sum_{l \text{ voisins de } i}^n \mathcal{C}_{il} + \sum_{l \text{ non voisins de } i}^n \mathcal{C}_{il} = 0.$$

Les termes de la deuxième somme, par le Lemme 5.3.4, valent tous $\mathcal{C}_{ii}\mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})$, donc

$$\sum_{l \text{ voisins de } i}^n \mathcal{C}_{il} = -\mathcal{C}_{ii}(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})).$$

Par la proposition 5.3.5, si l est voisin de i tel que $\hat{V}(B_i, B_l) > \hat{V}(B_i, S_k \setminus B_i)$ alors $|\mathcal{C}_{il}| \leq \mathcal{C}_{ii}e^{-\delta/\epsilon}$ donc

$$\sum_{l \text{ voisins de } i, \hat{V}(B_i, B_l) = \hat{V}(B_i, S_k \setminus B_i)}^n \mathcal{C}_{il} = -\mathcal{C}_{ii}(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})).$$

Si l est voisin de i tel que $\hat{V}(B_i, B_l) = \hat{V}(B_i, S_k \setminus B_i)$ et comme $\hat{V}(B_i, B_j) = \hat{V}(B_i, S_k \setminus B_i)$, par l'hypothèse 5.2.14 il existe $g \in G$ tel que $g(i) = i$ et $g(j) = l$. D'où, par la Proposition 5.2.27, tous les éléments de la somme sont égaux à \mathcal{C}_{ij} . De plus comme dans le chapitre 4, par des arguments algébriques, on voit que le nombre d'éléments de cette somme est

$$\frac{|G_i|}{|G_i \cap G_j|},$$

donc

$$\mathcal{C}_{ij} = -\frac{|G_i \cap G_j|}{|G_i|} \mathcal{C}_{ii}(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})),$$

d'où la première relation. Par le Corollaire 5.2.26 et la relation que l'on vient de démontrer, on a

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_{ij} &= \frac{\mathcal{C}_{ij}}{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2} = -\frac{|G_i \cap G_j|}{|G_i|} \frac{\mathcal{C}_{ii}}{\|h_i\|_2 \|h_j\|_2} (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) \\ &= -\frac{|G_i \cap G_j|}{|G_i|} \frac{\mathcal{C}_{ii}}{\|h_i\|_2^2} (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) = -\frac{|G_i \cap G_j|}{|G_i|} \mathcal{K}_{ii} (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})), \end{aligned}$$

d'où la deuxième relation. \square

Ces diverses propriétés sur la matrice \mathcal{K} nous permettent donc d'affirmer qu'elle est de la même forme que la matrice L du chapitre 4 définie dans (4.1.1).

En effet, si i et j sont non voisins alors le coefficient \mathcal{K}_{ij} est négligeable. Si i et j sont voisins, alors le coefficient \mathcal{K}_{ij} est exponentiellement proche de \mathcal{K}_{ii} fois un facteur. Du fait de l'estimation de la capacité \mathcal{C}_{ii} et de $\|h_i\|_2^2$, le comportement exponentiel de \mathcal{K}_{ij} est le même que celui de L_{ij} . Et les préfacteurs de $|G_i \cap G_j| \mathcal{C}_{ii}$ et $|G_i| \|h_i\|_2^2$ donnent respectivement les préfacteurs c_{ij} et m_i de la matrice L .

Nous pouvons alors montrer que les valeurs propres de L_ϵ sont proches des valeurs propres de \mathcal{K} en utilisant les vecteurs propres de \mathcal{K} que l'on obtient grâce au chapitre 4.

Théorème 5.3.7. *Les valeurs propres du générateur infinitésimal L_ϵ sont*

$$\lambda = \lambda_k(1 + \mathcal{O}(\epsilon^{\alpha/2}, e^{-\delta/\epsilon})), \quad (5.3.22)$$

où $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ sont les valeurs propres de la matrice \mathcal{K} . De plus si on pose $\hat{c} = (\hat{c}_1, \dots, \hat{c}_n)$ le vecteur propre normalisé de \mathcal{K} associé à la valeur propre λ_k et que l'on pose

$$J = \{j \in \{1, \dots, n\} \mid \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{c}_j \neq 0\}, \quad (5.3.23)$$

alors la fonction propre normalisée ϕ associée à la valeur propre λ s'écrit

$$\phi(y) = \sum_{j \in J} \hat{c}_j \frac{h_j(y)}{\|h_j\|_2} (1 + \mathcal{O}(\epsilon^{\alpha/2})) + \sum_{j \in J^c} \frac{h_j(y)}{\|h_j\|_2} \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), \quad (5.3.24)$$

pour un certain $\delta > 0$.

Démonstration. Soit $l \in \llbracket 1, n \rrbracket$. Comme nous savons que \mathcal{K} est de la même forme que la matrice L du chapitre 4 définie dans (4.1.1), définissons alors $\hat{c} = (\hat{c}_1, \dots, \hat{c}_n)$ comme étant un vecteur propre de \mathcal{K} associé à la valeur propre λ_l .

L'étude faite dans le chapitre 4 nous a permis de voir que les coordonnées des vecteurs propres sont soit des éléments exponentiellement petits, soit des éléments d'ordre 1. Posons

$$J = \{j \in \{1, \dots, n\} \mid \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \hat{c}_j \neq 0\},$$

puis normalisons \hat{c} de la manière suivante

$$\sum_{j \in J} \hat{c}_j^2 = 1.$$

Soit $i \in J$. En utilisant le Lemme 5.2.20 et la Proposition 5.3.1, les termes dépendants de λ dans la relation (5.2.38) vérifient

$$\sum_{j \in J} \hat{c}_j (-\lambda \delta_{ij} - \lambda (D_{ij} + B_{ij})) + \sum_{j \in J^c} -\|h_j\|_2 \lambda B_{ij} = -\hat{c}_i \lambda (1 + \mathcal{O}(\epsilon^{\alpha/2}, e^{-\delta/\epsilon})).$$

En utilisant le Lemme 5.2.20, la Proposition 5.2.21 et la Proposition 5.3.1, les termes indépendants de λ dans la relation (5.2.38) vérifient

$$\begin{aligned} \sum_{j \in J} \hat{c}_j (\mathcal{K}_{ij} + A_{ij}) + \sum_{j \in J^c} \|h_j\|_2 A_{ij} &= \sum_j \hat{c}_j \mathcal{K}_{ij} + \sum_{j \in J} \hat{c}_j A_{ij} + \sum_{j \in J^c} \|h_j\|_2 A_{ij} - \hat{c}_j \mathcal{K}_{ij} \\ &= \hat{c}_i \lambda_l + K_{ii} \mathcal{O}(\epsilon^{\alpha/2}, e^{-\delta/\epsilon}). \end{aligned}$$

On sait que les coefficients diagonaux de \mathcal{K} sont tous égaux et, grâce à l'analyse faite dans le chapitre 4, on a

$$\lambda_l = C K_{ii} (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})).$$

D'où

$$\sum_{j \in J} \hat{c}_j (\mathcal{K}_{ij} + A_{ij}) + \sum_{j \in J^c} \|h_j\|_2 A_{ij} = \hat{c}_i \lambda_l (1 + \mathcal{O}(\epsilon^{\alpha/2}, e^{-\delta/\epsilon})).$$

On en déduit donc

$$\lambda = \lambda_l (1 + \mathcal{O}(\epsilon^{\alpha/2}, e^{-\delta/\epsilon})).$$

Pour l'expression de la fonction propre, rappelons que ϕ^λ se décompose de la manière suivante

$$\phi^\lambda = \sum_{j \in J} c_j (h_j + \psi_j) + \sum_{j \in J^c} \psi_j.$$

Posons

$$g = \phi^\lambda - \sum_{j \in J} \hat{c}_j \frac{h_j}{\|h_j\|_2} = \sum_{j \in J} c_j \psi_j + \sum_{j \in J^c} \psi_j.$$

Alors la fonction g est solution du problème de Dirichlet

$$\begin{aligned} L_\epsilon f(x) &= 0, & x \in \Omega \setminus S_k, \\ f(x) &= \phi^\lambda(x) - c_j, & x \in \partial B_j, j \in J, \\ f(x) &= \phi^\lambda(x), & x \in \partial B_j, j \in J^c. \end{aligned}$$

En utilisant la représentation du noyau de Poisson (5.1.11) pour g , on a

$$\begin{aligned} g(x) &= \sum_{j \in J} -\epsilon \int_{\partial B_j} e^{-(V(y)-V(x))/\epsilon} (\phi^\lambda(x) - c_j) \partial_{n(y)} G_{\Omega \setminus S_k}(y, x) d\sigma_{S_k}(y) \\ &\quad + \sum_{j \in J^c} -\epsilon \int_{\partial B_j} e^{-(V(y)-V(x))/\epsilon} \phi^\lambda(x) \partial_{n(y)} G_{\Omega \setminus S_k}(y, x) d\sigma_{S_k}(y). \end{aligned}$$

En utilisant les bornes de ϕ^λ sur les ∂B_j , ainsi que la dérivée normale de $G_{\Omega \setminus S_k}$ est négative, on a

$$\begin{aligned} |g(x)| &\leq \sum_{j \in J} -\epsilon C \epsilon^{\alpha/2} c_j \int_{\partial B_j} e^{-(V(y)-V(x))/\epsilon} \partial_{n(y)} G_{\Omega \setminus S_k}(y, x) d\sigma_{S_k}(y) \\ &\quad + \sum_{j \in J^c} -\epsilon C \epsilon^{-d/4} e^{-\gamma/2\epsilon} e^{V(x_j)/2\epsilon} \int_{\partial B_j} e^{-(V(y)-V(x))/\epsilon} \partial_{n(y)} G_{\Omega \setminus S_k}(y, x) d\sigma_{S_k}(y). \end{aligned}$$

Pour tout j , la représentation du noyau de Poisson (5.1.11) de la fonction h_j est

$$h_j(x) = \sum_{j \in J} -\epsilon \int_{\partial B_j} e^{-(V(y)-V(x))/\epsilon} \partial_{n(y)} G_{\Omega \setminus S_k}(y, x) d\sigma_{S_k}(y).$$

On en déduit que

$$\begin{aligned} |g(x)| &\leq \sum_{j \in J} C \epsilon^{\alpha/2} c_j h_j(x) + \sum_{j \in J^c} C \epsilon^{-d/4} e^{-\gamma/2\epsilon} e^{V(x_j)/2\epsilon} h_j(x) \\ &= \sum_{j \in J} C \epsilon^{\alpha/2} \hat{c}_j \frac{h_j(x)}{\|h_j\|_2} + \sum_{j \in J^c} C \epsilon^{-d/4} e^{-\gamma/2\epsilon} e^{V(x_j)/2\epsilon} \|h_j\|_2 \frac{h_j(x)}{\|h_j\|_2}. \end{aligned}$$

Par le Lemme 5.2.19 on a

$$\|h_j\|_2 \leq C \epsilon^{d/4} e^{-V(x_j)/2\epsilon},$$

d'où

$$|g(x)| \leq \sum_{j \in J} C \epsilon^{\alpha/2} \hat{c}_j \frac{h_j(x)}{\|h_j\|_2} + \sum_{j \in J^c} C e^{-\gamma/2\epsilon} \frac{h_j(x)}{\|h_j\|_2}.$$

On déduit donc que

$$\phi^\lambda(y) = \sum_{j \in J} \hat{c}_j \frac{h_j(y)}{\|h_j\|_2} (1 + \mathcal{O}(e^{\alpha/2})) + \sum_{j \in J^c} \frac{h_j(y)}{\|h_j\|_2} \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), \quad (5.3.25)$$

pour un certain $\delta > 0$.

Comme les fonctions h_j sont presque orthogonales et que les \hat{c}_j induits des valeurs propres $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ de \mathcal{K} sont orthogonaux, les $\lambda_k(1 + \mathcal{O}(e^{\alpha/2}), e^{-\delta/\epsilon})$ sont des valeurs propres du générateur L_ϵ . De plus, on sait qu'il possède n valeurs propres exponentiellement petites, et comme nous en avons trouvé n , alors nous les avons toutes trouvées. \square

Pour terminer cette section il nous reste à voir que nous pouvons améliorer l'erreur.

Corollaire 5.3.8. *Le théorème précédent reste encore vrai en remplaçant les erreurs $\mathcal{O}(e^{\alpha/2})$ par $\mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})$, c'est à dire*

$$\lambda = \lambda_k(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})), \quad (5.3.26)$$

$$\phi(y) = \sum_{j \in J} \hat{c}_j \frac{h_j(y)}{\|h_j\|_2} (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) + \sum_{j \in J^c} \frac{h_j(y)}{\|h_j\|_2} \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}). \quad (5.3.27)$$

Démonstration. Soient λ une valeur propre, son ensemble J et sa fonction propre

$$\phi(y) = \sum_{j \in J} \hat{c}_j \frac{h_j(y)}{\|h_j\|_2} (1 + \mathcal{O}(e^{\alpha/2})) + \sum_{j \in J^c} \frac{h_j(y)}{\|h_j\|_2} \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}). \quad (5.3.28)$$

Soit $j \in J$. Du fait de l'expression de la fonction propre on a

$$\sup_{y \in B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \phi(y) - c_j \leq \text{osc}_{B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \phi \leq C\epsilon^{\alpha/2} \left| \inf_{y \in B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \phi(y) \right|$$

Considérons d'abord le cas où $\phi(x_j) > 0$. Alors

$$\text{osc}_{B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \phi \leq C\epsilon^{\alpha/2} \sup_{y \in B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \phi(y).$$

En utilisant l'inégalité de Hölder (Lemme 4.2 de [9]) on a

$$\text{osc}_{B_{\epsilon}(x_j)} \phi \leq C\epsilon^{\alpha/2} (C\epsilon^{\alpha/2} + \lambda\epsilon^{(d+1)/2}) \sup_{y \in B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \phi(y) \leq C\epsilon^{\alpha} \sup_{y \in B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \phi(y).$$

Puis en utilisant l'inégalité de Harnack (Lemme 4.1 de [9]) on a

$$\text{osc}_{B_{\epsilon}(x_j)} \phi \leq C\epsilon^{\alpha} \inf_{y \in B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \phi(y) \leq C\epsilon^{\alpha} \inf_{y \in B_{\epsilon}(x_j)} \phi(y) = C\epsilon^{\alpha} c_j.$$

D'où

$$\sup_{y \in B_{\epsilon}(x_j)} \left| \frac{\phi(y)}{c_j} - 1 \right| \leq C\epsilon^{\alpha}.$$

Considérons maintenant le cas où $\phi(x_j) < 0$. Alors

$$\text{osc}_{B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \phi \leq C\epsilon^{\alpha/2} \left(- \inf_{y \in B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \phi(y) \right) = C\epsilon^{\alpha/2} \sup_{y \in B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} (-\phi(y)).$$

Posons $\tilde{\phi} = -\phi$. Remarquons qu'on a

$$\text{osc } \tilde{\phi} = \text{osc } \phi.$$

En utilisant l'inégalité de Hölder (Lemme 4.2 de [9]) on a

$$\text{osc}_{B_{\epsilon}(x_j)} \tilde{\phi} \leq C\epsilon^{\alpha/2} (C\epsilon^{\alpha/2} + \lambda\epsilon^{(d+1)/2}) \sup_{y \in B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \tilde{\phi}(y) \leq C\epsilon^{\alpha} \sup_{y \in B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \tilde{\phi}(y).$$

Puis en utilisant l'inégalité de Harnack (Lemme 4.1 de [9]) on a

$$\text{osc}_{B_{\epsilon}(x_j)} \tilde{\phi} \leq C\epsilon^{\alpha} \inf_{y \in B_{4\sqrt{\epsilon}}(x_j)} \tilde{\phi}(y) \leq C\epsilon^{\alpha} \inf_{y \in B_{\epsilon}(x_j)} \tilde{\phi}(y) \leq C\epsilon^{\alpha} \sup_{y \in B_{\epsilon}(x_j)} \tilde{\phi}(y).$$

Comme

$$\sup_{y \in B_{\epsilon}(x_j)} \tilde{\phi}(y) = \sup_{y \in B_{\epsilon}(x_j)} -\phi(y) = - \inf_{y \in B_{\epsilon}(x_j)} \phi(y) = |c_j|,$$

alors on a

$$\text{osc}_{B_{\epsilon}(x_j)} \phi \leq C\epsilon^{\alpha} |c_j|,$$

d'où

$$\sup_{y \in B_{\epsilon}(x_j)} \left| \frac{\phi(y)}{c_j} - 1 \right| \leq C\epsilon^{\alpha}.$$

Donc pour tout $j \in J$ on a amélioré la relation (5.2.27) en

$$\sup_{y \in B_{\epsilon}(x_j)} \left| \frac{\phi(y)}{c_j} - 1 \right| \leq C\epsilon^{\alpha},$$

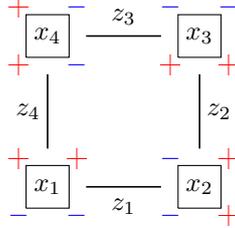
ce qui permet d'améliorer l'erreur du théorème en $\mathcal{O}(\epsilon^{\alpha})$. On peut répéter m -fois ce procédé pour obtenir une erreur d'ordre $\mathcal{O}(\epsilon^{(m+1)\alpha/2})$ jusqu'à ce qu'elle soit aussi petite que $\mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})$. \square

5.4 Applications au cas $N = 4$

Dans cette section nous allons illustrer notre théorie, dans le cas d'une orbite, avec notre potentiel de référence V_γ (2.0.1) que l'on rappelle

$$V_\gamma(x) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N x_i^4 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N x_i^2 + \frac{\gamma}{4} \sum_{i=1}^N (x_{i+1} - x_i)^2, \quad (5.4.1)$$

dans le cas $N = 4$ et $\gamma \in]\frac{2}{5}, 1[$. L'étude faite dans la section 2.4 nous permet de donner le graphe des liaisons



Rappelons l'expression des minima

$$\begin{aligned} x_1 &= (\sqrt{1-\gamma}, \sqrt{1-\gamma}, -\sqrt{1-\gamma}, -\sqrt{1-\gamma}), \\ x_2 &= (-\sqrt{1-\gamma}, \sqrt{1-\gamma}, \sqrt{1-\gamma}, -\sqrt{1-\gamma}), \\ x_3 &= (-\sqrt{1-\gamma}, -\sqrt{1-\gamma}, \sqrt{1-\gamma}, \sqrt{1-\gamma}), \\ x_4 &= (\sqrt{1-\gamma}, -\sqrt{1-\gamma}, -\sqrt{1-\gamma}, \sqrt{1-\gamma}), \end{aligned} \quad (5.4.2)$$

ainsi que l'expression des selles

$$\begin{aligned} z_1 &= (0, \sqrt{1-\gamma}, 0, -\sqrt{1-\gamma}), \\ z_2 &= (-\sqrt{1-\gamma}, 0, \sqrt{1-\gamma}, 0), \\ z_3 &= (0, -\sqrt{1-\gamma}, 0, \sqrt{1-\gamma}), \\ z_4 &= (\sqrt{1-\gamma}, 0, -\sqrt{1-\gamma}, 0). \end{aligned} \quad (5.4.3)$$

Remarquons que nous sommes bien dans le cas d'une orbite car

$$x_1 = R(x_4) = R^2(x_3) = R^3(x_2), \quad (5.4.4)$$

où R est la rotation défini comme dans (2.2.1).

Par le Lemme 5.3.4, les Proposition 5.3.1 et 5.3.6, on a que la matrice de capacité normalisée \mathcal{K} a l'expression

$$\begin{bmatrix} c & -\frac{1}{2}c(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) & c\mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}) & -\frac{1}{2}c(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) \\ -\frac{1}{2}c(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) & c & -\frac{1}{2}c(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) & c\mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}) \\ c\mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}) & -\frac{1}{2}c(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) & c & -\frac{1}{2}c(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) \\ -\frac{1}{2}c(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) & c\mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}) & -\frac{1}{2}c(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) & c \end{bmatrix}, \quad (5.4.5)$$

où

$$\begin{aligned} c &= \frac{\text{cap}_{B_1}(S_4 \setminus B_1)}{\|h\|_2} = \frac{\text{cap}_{B_2}(S_4 \setminus B_2)}{\|h\|_2} = \frac{\text{cap}_{B_3}(S_4 \setminus B_3)}{\|h\|_2} = \frac{\text{cap}_{B_4}(S_4 \setminus B_4)}{\|h\|_2}, \\ \|h\|_2 &= \|h_1\|_2 = \|h_2\|_2 = \|h_3\|_2 = \|h_4\|_2. \end{aligned} \quad (5.4.6)$$

De plus en utilisant le Théorème 5.1 de [9] et l'étude de la section 2.4 on a

$$\text{cap}_{B_1}(S_4 \setminus B_1) = e^{\frac{1}{2}(1-\gamma)^2/\epsilon} \frac{(2\pi\epsilon)^{d/2} 2(1-\gamma)}{2\pi\sqrt{(\gamma+1)(1-\gamma)^2}} (1 + \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon|\ln \epsilon|^3})), \quad (5.4.7)$$

et en utilisant la Proposition 5.2.19 on a

$$\|h\|_2 = e^{(1-\gamma)^2/\epsilon} \frac{(2\pi\epsilon)^{d/2}}{\sqrt{4(2-\gamma)(1-\gamma)^2}} (1 + \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon|\ln \epsilon|^3})), \quad (5.4.8)$$

d'où

$$c = e^{-\frac{1}{2}(1-\gamma)^2/\epsilon} \frac{2(1-\gamma)\sqrt{2-\gamma}}{\pi\sqrt{\gamma+1}} (1 + \mathcal{O}(\sqrt{\epsilon|\ln \epsilon|^3})). \quad (5.4.9)$$

Avec l'étude faite dans le chapitre 4, les vecteurs propres normalisés de \mathcal{K} sont

$$\begin{aligned} v_1 &= \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right), \\ v_2 &= \left(-\frac{1}{2} + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), \frac{1}{2} + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), -\frac{1}{2} + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), \frac{1}{2} + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}) \right), \\ v_3 &= \left(\mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), -\frac{1}{\sqrt{2}} + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), \frac{1}{\sqrt{2}} + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}) \right), \\ v_4 &= \left(-\frac{1}{\sqrt{2}} + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), \frac{1}{\sqrt{2}} + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}) \right). \end{aligned} \quad (5.4.10)$$

Les ensembles J induits par ces vecteurs propres ainsi que les \hat{c}_j sont donc

$$\begin{aligned} J_1 &= \{1, 2, 3, 4\}, \quad \hat{c}_1 = \hat{c}_2 = \hat{c}_3 = \hat{c}_4 = \frac{1}{2}, \\ J_2 &= \{1, 2, 3, 4\}, \quad \hat{c}_1 = \hat{c}_3 = -\frac{1}{2}, \quad \hat{c}_2 = \hat{c}_4 = \frac{1}{2}, \\ J_3 &= \{2, 4\}, \quad -\hat{c}_2 = \hat{c}_4 = \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ J_4 &= \{1, 3\}, \quad -\hat{c}_1 = \hat{c}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \quad (5.4.11)$$

En utilisant le Théorème 5.3.7 on en déduit alors que les valeurs propres sont

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0, \\ \lambda_2 &= 2c(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})), \\ \lambda_3 &= c(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})), \\ \lambda_4 &= c(1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})), \end{aligned} \quad (5.4.12)$$

et les fonctions propres associées aux valeurs propres du générateur L_ϵ

$$\begin{aligned} \phi_1(y) &= \frac{1}{2\|h\|_2}, \\ \phi_2(y) &= \frac{1}{2\|h\|_2} [-h_1(y) + h_2(y) - h_3(y) + h_4(y)] (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})), \\ \phi_3(y) &= \frac{1}{\sqrt{2}\|h\|_2} [-h_2(y) + h_4(y)] (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) + \frac{1}{\|h\|_2} [h_1(y) + h_3(y)] \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}), \\ \phi_4(y) &= \frac{1}{\sqrt{2}\|h\|_2} [-h_1(y) + h_3(y)] (1 + \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon})) + \frac{1}{\|h\|_2} [h_2(y) + h_4(y)] \mathcal{O}(e^{-\delta/\epsilon}). \end{aligned} \quad (5.4.13)$$

Annexe A

Représentation des groupes finis

Nous donnons dans cette annexe, tirée du livre de Y. Kosmann-Schwarzbach [25] ainsi que celui de J.-P. Serre [36], la base de la théorie des représentations des groupes finis pour mieux comprendre la section 4.2 où nous l'avons utilisée.

A.1 Représentation

A.1.1 Généralités

E est un espace vectoriel sur \mathbb{K} ($\mathbb{K} = \mathbb{R}$ ou \mathbb{C}), et $\text{GL}(E)$ est le groupe des isomorphismes \mathbb{K} -linéaires de E .

Définition A.1.1. Une représentation d'un groupe G est la donnée d'un espace vectoriel complexe de dimension finie, E , et d'un endomorphisme de groupe $\pi : G \rightarrow \text{GL}(E)$.

Donc pour tous $g, g' \in G$ on a :

$$\pi(gg') = \pi(g)\pi(g'), \pi(g^{-1}) = (\pi(g))^{-1}, \pi(e_G) = \text{Id}_E$$

La dimension de E s'appelle la dimension de la représentation, on la note $\dim \pi$. On désigne une telle représentation par (E, π) ou π .

On appelle représentation triviale toute représentation telle que $\pi(g) = \text{Id}_E$ pour tout $g \in G$.

Exemple A.1.2. Considérons $E = \mathbb{C}^2$ et $G = \mathfrak{S}_3$. On pose $j = e^{\frac{2i\pi}{3}}$, $a = (23)$ et $b = (123)$. Une représentation possible de G dans E est :

$$\pi(e) = \mathbf{1}, \pi(a) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \pi(b) = \begin{pmatrix} j & 0 \\ 0 & j^2 \end{pmatrix}$$

Définition A.1.3. Soit \langle, \rangle un produit scalaire sur E . On dit que la représentation π est unitaire si $\pi(g)$ est unitaire pour tout $g \in G$, c'est à dire :

$$\forall g \in G, \forall x, y \in E, \langle \pi(g)x, \pi(g)y \rangle = \langle x, y \rangle.$$

Une représentation π est dite unitarisable s'il existe un produit scalaire sur E tel que π soit unitaire.

Pour démontrer divers théorèmes et propositions nous avons besoin du lemme suivant :

Lemme A.1.4. Soit G un groupe fini. Pour toute fonction φ de G dans un espace vectoriel on a :

$$\forall g \in G, \sum_{h \in G} \varphi(gh) = \sum_{h \in G} \varphi(hg) = \sum_{k \in G} \varphi(k) \quad (\text{A.1.1})$$

Démonstration. Soit $g \in G$. Tout élément de G s'écrit de manière unique sous la forme gh (respectivement hg) où $h \in G$. \square

Théorème A.1.5. *Toute représentation d'un groupe fini est unitarisable.*

Démonstration. Soit π une représentation de G et soit \langle, \rangle un produit scalaire sur E . Considérons

$$\langle x, y \rangle' = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \langle \pi(g)x, \pi(g)y \rangle.$$

C'est un produit scalaire sur E , car supposons $\langle x, x \rangle' = 0$ alors $\sum_{g \in G} \langle \pi(g)x, \pi(g)x \rangle = 0$. Donc pour tout $g \in G$, $\langle \pi(g)x, \pi(g)x \rangle = 0$, d'où pour $g = e$ on a $\langle x, x \rangle = 0$ donc $x = 0$.

Par le lemme précédent on voit que ce nouveau produit scalaire est invariant par π :

$$\begin{aligned} \langle \pi(g)x, \pi(g)y \rangle' &= \frac{1}{|G|} \sum_{h \in G} \langle \pi(h)\pi(g)x, \pi(h)\pi(g)y \rangle \\ &= \frac{1}{|G|} \sum_{h \in G} \langle \pi(hg)x, \pi(hg)y \rangle = \frac{1}{|G|} \sum_{k \in G} \langle \pi(k)x, \pi(k)y \rangle = \langle x, y \rangle'. \end{aligned}$$

Donc π est une représentation unitaire de G dans E, \langle, \rangle' . □

A.1.2 Représentations irréductibles

Soit π une représentation de G . Un sous espace vectoriel $F \subset E$ est dit stable par π si pour tout $g \in G$, $\pi(g)F \subset F$ (ce qui entraîne $\pi(g)F = F$). On peut alors parler de la représentation π restreinte à F qui est une représentation de G dans F . On la note π_F . Une telle représentation s'appelle une sous-représentation.

Définition A.1.6. *Une représentation π de G est dite irréductible si $E \neq \{0\}$ et si les seuls sous-espaces vectoriels de E invariants par π sont $\{0\}$ et E .*

Exemple A.1.7. La représentation de dimension 2 de \mathfrak{S}_3 vue dans l'exemple A.1.2 est irréductible.

Proposition A.1.8. *Toute représentation irréductible d'un groupe fini est de dimension finie.*

Démonstration. Soient π une représentation irréductible de G et $x \in E \setminus \{0\}$. Comme G est fini, le sous-ensemble $\{\pi(g)x | g \in G\}$ est fini. Il engendre un sous espace vectoriel de E de dimension finie qui n'est pas réduit à $\{0\}$ car $x \neq 0$. De plus il est invariant par π donc il est égal à E . Donc π est de dimension finie. □

A.1.3 Somme directe de représentations

Définition A.1.9. *Soient (E_1, π_1) et (E_2, π_2) des représentations de G . Alors :*

$$(E_1 \oplus E_2, \pi_1 \oplus \pi_2)$$

où $(\pi_1 \oplus \pi_2)(x_1, x_2) = (\pi_1(x_1), \pi_2(x_2))$, est une représentation de G appelée somme directe des représentations (E_1, π_1) et (E_2, π_2) .

Remarque A.1.10. La somme directe de représentations de dimension non nulle (même irréductible) n'est pas irréductible.

Pour des représentations matricielles π_1 et π_2 , les matrices de la représentation somme directe de π_1 et π_2 sont des matrices diagonales par blocs

$$\begin{pmatrix} \pi_1(g) & 0 \\ 0 & \pi_2(g) \end{pmatrix}$$

Plus généralement si m est un entier positif strict, on définit par récurrence la somme directe de m représentations $\pi_1 \oplus \dots \oplus \pi_m$. Si π est une représentation de G on notera $m\pi$ la représentation $\pi \oplus \dots \oplus \pi$ (m -fois) sur l'espace vectoriel $E \oplus \dots \oplus E$ (m -fois).

Définition A.1.11. Une représentation est complètement irréductible si elle est somme directe de représentations irréductibles.

Lemme A.1.12. Soit π une représentation unitaire de G dans (E, \langle, \rangle) . Si $F \subset E$ est invariant par π alors $F^\perp = \{y \in E \mid \forall x \in F, \langle x, y \rangle = 0\}$ est aussi invariant par π .

Démonstration. Soit $y \in F^\perp$. Alors pour $x \in F$, comme F est invariant par π , on a

$$\langle x, \pi(g)y \rangle = \langle \pi(g^{-1})x, y \rangle = 0.$$

Donc $\pi(g)y \in F^\perp$. □

Théorème A.1.13. (Théorème de Maschke) Toute représentation de dimension finie d'un groupe fini G est complètement irréductible.

Démonstration. On va prouver par récurrence, sur la dimension de E (qui est la dimension de la représentation), la propriété :

$P(n)$ = "Toute représentation de dimension finie n d'un groupe fini G est complètement irréductible".

Pour $\dim(E) = 1$ le résultat est trivial. Supposons la propriété vraie jusqu'à un certain rang $k \geq 1$, montrons $P(k+1)$.

Soit (E, π) une représentation de G de dimension $n+1$. D'après le théorème A.1.5 on peut supposer que π est unitaire. Si π n'est pas irréductible alors il existe un sous-espace vectoriel F invariant par π tel que $F \neq \{0\}$ et $F \neq E$. Alors $E = F \oplus F^\perp$, où F (par hypothèse) et F^\perp (d'après le lemme A.1.12) sont invariants par π et $\dim F < \dim E$, $\dim F^\perp < \dim E$. On peut alors considérer les sous représentations π_F et π_{F^\perp} . Elles vérifient $\pi = \pi_F \oplus \pi_{F^\perp}$. Comme elles sont de dimension au plus n , l'hypothèse de récurrence s'applique et nous donne le résultat. □

A.1.4 Opérateur d'entrelacement et lemme de Schur

Définition A.1.14. Soient (E_1, π_1) et (E_2, π_2) des représentations de G . On dit qu'une application linéaire $T : E_1 \rightarrow E_2$, entrelace π_1 et π_2 si

$$\forall g \in G, \pi_2(g) \circ T = T \circ \pi_1(g)$$

et T s'appelle alors opérateur d'entrelacement entre π_1 et π_2 .

Remarque A.1.15. Si $E_1 = E_2 = E$ et $\pi_1 = \pi_2 = \pi$, un opérateur qui entrelace π_1 et π_2 est un opérateur qui commute à π .

Définition A.1.16. Les représentations π_1 et π_2 sont dites équivalentes s'il existe un opérateur d'entrelacement bijectif entre π_1 et π_2 .

Lemme A.1.17. Si T entrelace π_1 et π_2 alors $\ker T$ (le noyau de T) est invariant par π_1 et $\text{Im } T$ (l'image de T) est invariante par π_2 .

Démonstration. Soit $x \in \ker T$ alors $T(\pi_1(g)x) = \pi_2(g)(Tx) = 0$. Donc $\ker T$ est invariant par π_1 .

Soit $y \in \text{Im } T$ alors il existe $x \in E_1$ tel que $Tx = y$. D'où $\pi_2(g)y = \pi_2(g)(Tx) = T(\pi_1(g)x)$. Donc $\text{Im } T$ est invariant par π_2 . □

Lemme A.1.18. Si T et π commutent alors tout sous-espace propre de T est invariant par π .

Démonstration. Soient E_λ un sous espace propre de T et $x \in E_\lambda$. Alors

$$T(\pi(g)x) = \pi(g)(Tx) = \pi(g)\lambda x = \lambda \pi(g)x.$$

Donc E_λ est invariant par π . □

Théorème A.1.19. (Lemme de Schur) Soit T un opérateur d'entrelacement des représentations irréductibles de G , (E_1, π_1) et (E_2, π_2) . Alors :

- si π_1 et π_2 ne sont pas équivalentes alors $T = 0$,
- si $E_1 = E_2 = E$ et $\pi_1 = \pi_2 = \pi$ alors T est un multiple scalaire de l'identité de E .

Démonstration. Si π_1 et π_2 ne sont pas équivalentes alors T n'est pas bijectif et donc soit $\ker T \neq 0$, soit $\text{Im } T \neq 0$. D'après le lemme A.1.17 $\ker T$ est invariant par π_1 . Comme π_1 est irréductible si $\ker T \neq 0$ alors $\ker T = E_1$ donc $T = 0$. D'après le lemme A.1.17 $\text{Im } T$ est invariant par π_2 . Comme π_2 est irréductible si $\text{Im } T \neq E_2$ alors $\text{Im } T = \{0\}$ donc $T = 0$.

Si $E_1 = E_2 = E$ et $\pi_1 = \pi_2 = \pi$ alors pour tout $g \in G$, $\pi(g) \circ T = T \circ \pi(g)$. Même si E est un \mathbb{R} -espace vectoriel, considérons le comme un \mathbb{C} -espace vectoriel. Alors il existe $\lambda \in \mathbb{C}$ valeur propre de T et soit E_λ son sous-espace propre associé. D'après le lemme A.1.18 E_λ est invariant par π et comme elle est irréductible on a $E_\lambda = E$. Donc $T = \lambda \text{Id}_E$. \square

A.2 Caractères et relations d'orthogonalité

A.2.1 Fonctions sur un groupe, coefficients matriciels

Dans toute la suite G sera un groupe fini. On désignera par $\mathcal{F}(G)$ l'espace vectoriel des fonctions sur G à valeurs dans \mathbb{C} . On désigne l'espace hilbertien $L^2(G)$ par l'espace vectoriel $\mathcal{F}(G)$ lorsqu'il est muni du produit scalaire suivant :

Définition A.2.1. Sur $L^2(G)$ le produit scalaire est défini par

$$\langle f_1, f_2 \rangle = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \overline{f_1(g)} f_2(g).$$

Définition A.2.2. Si π est une représentation de G dans \mathbb{C}^n , pour tout $i, j \in \{1, \dots, n\}$, on note la fonction $\pi_{ij} \in L^2(G)$ qui associe à $g \in G$ le coefficient de la matrice de $\pi(g)$ situé sur la i^e ligne et la j^e colonne, un coefficient matriciel de π .

Proposition A.2.3. Si π est une représentation unitaire alors

$$\pi(g^{-1}) = (\pi(g))^{-1} = {}^t \overline{(\pi(g))}$$

Démonstration. Comme π est unitaire pour le produit scalaire \langle, \rangle on a :

$$\forall x, y \in E, \langle \pi(g)x, \pi(g)y \rangle = \langle x, y \rangle.$$

Si on considère l'adjoint $\pi^* = {}^t \overline{\pi}$ de π on a la relation :

$$\forall x, y \in E, \langle \pi(g)x, y \rangle = \langle x, \pi^*(g)y \rangle.$$

Alors :

$$\begin{aligned} \forall x, y \in E, \langle x, \pi^*(g)y \rangle &= \langle \pi(g)x, y \rangle = \langle \pi(g)x, \pi(g)\pi(g)^{-1}y \rangle \\ &= \langle x, \pi(g)^{-1}y \rangle \end{aligned}$$

D'où :

$$\forall x, y \in E, \langle x, \pi^*(g)y - \pi(g)^{-1}y \rangle = 0$$

On en déduit :

$$\forall y \in E, \pi^*(g)y - \pi(g)^{-1}y = 0$$

Donc :

$$\pi(g^{-1}) = \pi(g)^{-1} = \pi^*(g) = {}^t \overline{(\pi(g))}$$

\square

Corollaire A.2.4. Si π est une représentation unitaire dans une base orthonormale alors

$$\pi_{ij}(g^{-1}) = \overline{\pi_{ji}(g)}$$

Démonstration. Immédiat par la proposition précédente. \square

A.2.2 Caractère d'une représentation

Définition A.2.5. Soit π une représentation de G . On appelle caractère de π la fonction χ_π de G dans \mathbb{C} définie par :

$$\forall g \in G, \chi_\pi(g) = \text{Tr}(\pi(g)),$$

où Tr désigne la trace.

Remarque A.2.6. Deux représentations équivalentes ont un même caractère. Donc sur chaque classe de conjugaison de G la fonction χ_π est constante.

Définition A.2.7. On appelle fonction centrale sur G une fonction constante sur chaque classe de conjugaison.

Remarque A.2.8. Les caractères sont des fonctions centrales.

Proposition A.2.9. On a les propriétés des caractères suivantes :

- $\chi_\pi(e) = \dim(\pi)$
- $\forall g \in G, \chi_\pi(g^{-1}) = \overline{\chi_\pi(g)}$
- $\chi_{\pi_1 \oplus \pi_2} = \chi_{\pi_1} + \chi_{\pi_2}$

Démonstration. • Pour une représentation matricielle de dimension $n = \dim(\pi)$ on a :

$$\chi_\pi(g) = \sum_{i=1}^n (\pi(g))_{ii}.$$

Pour $g = e$ on obtient : $\chi_\pi(g) = \sum_{i=1}^n 1 = \dim(\pi)$.

- Comme G est fini, π est unitarisable. On normalise la base, et avec le corollaire A.2.4, on a :

$$\chi_\pi(g^{-1}) = \sum_{i=1}^n (\pi(g^{-1}))_{ii} = \sum_{i=1}^n \overline{(\pi(g))_{ii}} = \overline{\sum_{i=1}^n (\pi(g))_{ii}} = \overline{\chi_\pi(g)}$$

- Pour tout $g \in G$ la représentation matricielle de $\pi_1 \oplus \pi_2(g)$ est

$$\begin{pmatrix} \pi_1(g) & 0 \\ 0 & \pi_2(g) \end{pmatrix}$$

La propriété de la somme en découle. □

Corollaire A.2.10. Soient π_1 et π_2 deux représentations de G on a

$$\langle \chi_{\pi_1}, \chi_{\pi_2} \rangle = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi_{\pi_1}(g^{-1}) \chi_{\pi_2}(g).$$

Démonstration. Par le point 2 de la proposition A.2.9 la démonstration est triviale. □

A.2.3 Produit tensoriel et caractère

On a vu des relations sur la somme directe. Nous allons maintenant nous intéresser au produit tensoriel qui est une propriété importante des caractères.

Définition A.2.11. Soient E et F des espaces vectoriels de dimension finie. On peut définir le produit tensoriel $E \otimes F$ comme l'espace vectoriel des applications bilinéaires de $E^* \times F^*$ dans \mathbb{K} , c'est à dire, soient $x \in E$ et $y \in F$ on a :

$$\forall (\phi, \psi) \in E^* \times F^*, (x \otimes y)(\phi, \psi) = \phi(x)\psi(y)$$

Proposition A.2.12. Soient (e_1, \dots, e_n) une base de E et (f_1, \dots, f_p) une base de F . Alors $(e_i \otimes f_j)_{i \in \{1, \dots, n\}, j \in \{1, \dots, p\}}$ est une base de $E \otimes F$.

Démonstration. Soient $x = \sum_i x_i e_i \in E$ et $y = \sum_j y_j f_j \in F$. Soient $(\phi, \psi) \in E^* \times F^*$, on a :

$$\begin{aligned} (x \otimes y)(\phi, \psi) &= \phi(x)\psi(y) = \phi\left(\sum_{i=1}^n x_i e_i\right)\psi\left(\sum_{j=1}^p y_j f_j\right) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p x_i y_j \phi(e_i)\psi(f_j) \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p x_i y_j (e_i \otimes y_j)(\phi, \psi) \end{aligned}$$

Donc :

$$(x \otimes y) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^p x_i y_j (e_i \otimes y_j)$$

La famille engendre $E \otimes F$. Soient $x = \sum_i x_i e_i \in E$ et $y = \sum_j y_j f_j \in F$ tel que $(x \otimes y) = 0$. C'est à dire pour tout $(\phi, \psi) \in E^* \times F^*$, $(x \otimes y)(\phi, \psi) = 0$. En prenant $\phi = e_i^*$ et $\psi = e_j^*$ on a :

$$0 = (x \otimes y)(\phi, \psi) = x_i y_j.$$

La famille est libre, c'est donc une base. \square

Définition A.2.13. Soient $u : E \rightarrow E$ et $v : F \rightarrow F$ des applications linéaires, on définit par $u \otimes v$ l'unique endomorphisme satisfaisant :

$$\forall x \in E, y \in F, (u \otimes v)(x \otimes y) = (u(x) \otimes v(y))$$

Proposition A.2.14. Soient (e_1, \dots, e_n) une base de E et (f_1, \dots, f_p) une base de F . Soient $u : E \rightarrow E$ (respectivement $v : F \rightarrow F$) application linéaire de matrice $A = (a_{ij})$ (respectivement $B = (b_{ij})$). Alors dans les bases choisies la matrice de $u \otimes v$ est :

$$\forall \alpha \in \{1, \dots, n\}, \quad \forall \beta \in \{1, \dots, p\}, \quad (u \otimes v)(e_\alpha \otimes f_\beta) = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^p a_{k\alpha} b_{l\beta} (e_k \otimes f_l)$$

Démonstration. Soient $\alpha \in \{1, \dots, n\}$ et $\beta \in \{1, \dots, p\}$. Soient $\phi \in E^*$ et $\psi \in F^*$. Alors :

$$\begin{aligned} (u \otimes v)(e_\alpha \otimes f_\beta)(\phi, \psi) &= (u(e_\alpha) \otimes v(f_\beta))(\phi, \psi) = \phi(u(e_\alpha))\psi(v(f_\beta)) \\ &= \phi\left(\sum_{k=1}^n a_{k\alpha} e_k\right)\psi\left(\sum_{l=1}^p b_{l\beta} f_l\right) = \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^p a_{k\alpha} b_{l\beta} \phi(e_k)\psi(f_l) \\ &= \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^p a_{k\alpha} b_{l\beta} (e_k \otimes f_l)(\phi, \psi) \end{aligned}$$

D'où le résultat. \square

Théorème A.2.15. Soient (E_1, π_1) et (E_2, π_2) des représentations de G , on pose :

$$(\pi_1 \otimes \pi_2)(g) = \pi_1(g) \otimes \pi_2(g).$$

Alors $\pi_1 \otimes \pi_2$ définit une représentation de G dans $E_1 \otimes E_2$ et

$$\chi_{\pi_1 \otimes \pi_2} = \chi_{\pi_1} \chi_{\pi_2}.$$

Démonstration. Soient $g, g' \in G$, $x \in E_1$ et $y \in E_2$. Alors :

$$\begin{aligned} (\pi_1 \otimes \pi_2)(gg')(x \otimes y) &= (\pi_1(gg') \otimes \pi_2(gg'))(x \otimes y) = (\pi_1(gg')x \otimes \pi_2(gg')y) \\ &= (\pi_1(g)\pi_1(g')x \otimes \pi_2(g)\pi_2(g')y) = (\pi_1(g) \otimes \pi_2(g))(\pi_1(g')x \otimes \pi_2(g')y) \\ &= (\pi_1(g) \otimes \pi_2(g))(\pi_1(g') \otimes \pi_2(g'))(x \otimes y) = (\pi_1 \otimes \pi_2)(g)(\pi_1 \otimes \pi_2)(g')(x \otimes y) \end{aligned}$$

D'où :

$$(\pi_1 \otimes \pi_2)(gg') = (\pi_1 \otimes \pi_2)(g)(\pi_1 \otimes \pi_2)(g')$$

Donc $\pi_1 \otimes \pi_2$ définit une représentation de G dans $E_1 \otimes E_2$. Grâce à la proposition précédente, en prenant (e_1, \dots, e_n) une base de E_1 et (f_1, \dots, f_p) une base de E_2 , on a :

$$\begin{aligned} \chi_{\pi_1 \otimes \pi_2} &= \text{Tr}(\pi_1 \otimes \pi_2) = \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^p (e_\alpha \otimes f_\beta)^* (\pi_1 \otimes \pi_2)(e_\alpha \otimes f_\beta) \\ &= \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^p (e_\alpha \otimes f_\beta)^* \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^p a_{k\alpha} b_{l\beta} (e_k \otimes f_l) = \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=1}^p a_{\alpha\alpha} b_{\beta\beta} \\ &= \left(\sum_{\alpha=1}^n a_{\alpha\alpha} \right) \left(\sum_{\beta=1}^p b_{\beta\beta} \right) = \text{Tr}(\pi_1) \text{Tr}(\pi_2) = \chi_{\pi_1} \chi_{\pi_2} \end{aligned}$$

□

A.2.4 Relation d'orthogonalité

On va montrer que les caractères de représentations irréductibles inéquivalentes sont orthogonaux et que le caractère d'une représentation irréductible est de norme 1.

Proposition A.2.16. *Soient (E_1, π_1) et (E_2, π_2) des représentations de G et soit $u : E_1 \rightarrow E_2$ une application linéaire. Alors l'application linéaire*

$$T_u = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \pi_2(g) u \pi_1(g)^{-1} \quad (\text{A.2.1})$$

de E_1 dans E_2 entrelace π_1 et π_2 .

Démonstration. En utilisant le lemme A.1.4 on a :

$$\begin{aligned} \pi_2(g) T_u &= \frac{1}{|G|} \sum_{h \in G} \pi_2(gh) u \pi_1(h^{-1}) = \frac{1}{|G|} \sum_{k \in G} \pi_2(k) u \pi_1(k^{-1}g) = \frac{1}{|G|} \sum_{k \in G} \pi_2(k) u \pi_1(k^{-1}) \pi_1(g) \\ \pi_2(g) T_u &= T_u \pi_1(g) \end{aligned}$$

□

L'opérateur T_u est donc un opérateur d'entrelacement entre π_1 et π_2 .

Proposition A.2.17. *Soient (E_1, π_1) et (E_2, π_2) des représentations irréductibles de G , soit $u : E_1 \rightarrow E_2$ une application linéaire et soit T_u définie comme dans la relation A.2.1. On a :*

- si π_1 et π_2 sont inéquivalentes alors $T_u = 0$
- si $E_1 = E_2 = E$ et $\pi_1 = \pi_2 = \pi$ alors

$$T_u = \frac{\text{Tr}(u)}{\dim E} \text{Id}_E.$$

Démonstration. Par le lemme de Schur A.1.19 le premier point est démontré. Pour le deuxième point par le lemme de Schur A.1.19 on a $T_u = \lambda \text{Id}_E$, il nous faut donc calculer λ . Or :

$$\text{Tr}(T_u) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \text{Tr}(\pi(g) u \pi(g)^{-1}) = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \text{Tr}(u) = \text{Tr}(u)$$

Donc :

$$\lambda \dim E = \text{Tr}(u) \Leftrightarrow \lambda = \frac{\text{Tr}(u)}{\dim E}$$

□

Proposition A.2.18. Soient (E_1, π_1) et (E_2, π_2) des représentations irréductibles de G . En prenant des bases de E_1 et E_2 on a :

- si π_1 et π_2 sont inéquivalentes alors

$$\forall i, j, k, l, \sum_{g \in G} (\pi_2(g))_{kl} (\pi_1(g^{-1}))_{ji} = 0$$

- si $E_1 = E_2 = E$ et $\pi_1 = \pi_2 = \pi$ alors

$$\forall i, j, k, l, \sum_{g \in G} (\pi(g))_{kl} (\pi(g^{-1}))_{ji} = \frac{\delta_{ki} \delta_{lj}}{\dim E}$$

Démonstration. Soient $(e_j)_{j \in \{1, \dots, n\}}$ une base de E_1 et $(f_l)_{l \in \{1, \dots, p\}}$ une base de E_p . Pour $u : E_1 \rightarrow E_2$ prenons T_u définie par A.2.1. Alors :

$$\forall k \in \{1, \dots, n\} \forall i \in \{1, \dots, p\}, (T_u)_{ki} = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \sum_{m=1}^n \sum_{q=1}^p (\pi_2(g))_{kq} u_{qm} (\pi_1(g^{-1}))_{mi}$$

Choisissons pour u l'application $u_{lj} : E_1 \rightarrow E_2$ définie par $u_{lj}(e_k) = \delta_{jk} f_l$. Alors :

$$(u_{lj})_{mq} = \delta_{ml} \delta_{qj}.$$

Donc :

$$(T_{u_{lj}})_{ki} = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} (\pi_2(g))_{kl} (\pi_1(g^{-1}))_{ji}$$

On applique alors la proposition A.2.17 et on a :

- si π_1 et π_2 sont inéquivalentes alors $(T_{u_{lj}})_{ki}$ est toujours nulle d'où le premier point,
- si $E_1 = E_2 = E$ et $\pi_1 = \pi_2 = \pi$ alors

$$\sum_{g \in G} (\pi(g))_{kl} (\pi(g^{-1}))_{ji} = (T_{u_{lj}})_{ki} = \frac{\text{Tr}(u_{lj})}{\dim E} \delta_{ki} = \frac{\delta_{ki} \delta_{lj}}{\dim E}$$

ce qui démontre le deuxième point. □

Corollaire A.2.19. Soient (E_1, π_1) et (E_2, π_2) des représentations unitaires irréductibles de G . En prenant des bases orthonormales de E_1 et E_2 on a :

- si π_1 et π_2 sont inéquivalentes alors

$$\forall i, j, k, l, \sum_{g \in G} \langle (\pi_1)_{ij}, (\pi_2)_{kl} \rangle = 0$$

- si $E_1 = E_2 = E$ et $\pi_1 = \pi_2 = \pi$ alors

$$\forall i, j, k, l, \sum_{g \in G} \langle (\pi_1)_{ij}, (\pi_2)_{kl} \rangle = \frac{\delta_{ki} \delta_{lj}}{\dim E}$$

Démonstration. Par le corollaire A.2.4 on a :

$$\frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} (\pi_2(g))_{kl} (\pi_1(g^{-1}))_{ji} = \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} (\pi_2(g))_{kl} \overline{(\pi_1(g))_{ij}} = \langle (\pi_1)_{ij}, (\pi_2)_{kl} \rangle$$

La proposition précédente conclue la preuve du corollaire. □

Théorème A.2.20. Relations d'orthogonalité

- Si π_1 et π_2 sont des représentations irréductibles inéquivalentes alors $\langle \chi_{\pi_1}, \chi_{\pi_2} \rangle = 0$
- Si π est une représentation irréductible alors

$$\langle \chi_\pi, \chi_\pi \rangle = 1$$

Démonstration. Par le corollaire A.2.10 et la proposition précédente si π_1 et π_2 sont des représentations irréductibles inéquivalentes alors $\langle \chi_{\pi_1}, \chi_{\pi_2} \rangle = 0$. Si $\pi_1 = \pi_2 = \pi$ alors

$$\frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \pi(g)_{ii} \pi(g^{-1})_{jj} = \frac{\delta_{ij}}{\dim E} \text{ donc } \langle \chi_\pi, \chi_\pi \rangle = 1. \quad \square$$

On appelle caractères irréductibles de G l'ensemble des caractères des représentations inéquivalentes de G . On note χ_i le caractère d'une représentation irréductible π_i . Le théorème précédent nous montre que les caractères des représentations irréductibles de G forment un système orthonormal dans $L^2(G)$. A partir de la proposition suivante on pourra conclure que les représentations irréductibles inéquivalentes de G sont en nombre fini.

Proposition A.2.21. *L^2G est de dimension finie.*

Démonstration. Comme G est de dimension finie on voit aisément que la famille de fonction $\{1_g | g \in G\}$ est une base de $L^2(G)$ et que $\dim L^2(G) = |G|$. \square

On a donc le théorème suivant.

Théorème A.2.22. *Les représentations irréductibles inéquivalentes de G sont en nombre fini.*

Démonstration. Comme les caractères des représentations irréductibles de G forment un système orthonormal dans $L^2(G)$, et par la Proposition A.2.21 $L^2(G)$ est de dimension finie, on en déduit donc le résultat. \square

Les représentations irréductibles inéquivalentes de G sont en nombre fini, on notera donc \hat{G} l'ensemble des classes d'équivalence de représentations irréductibles de G .

A.2.5 Table de caractères

On appelle ainsi la table dont les colonnes correspondent aux éléments du groupe et dont les lignes correspondent aux représentations irréductibles inéquivalentes de ce groupe. A l'intersection de la ligne et de la colonne on a la valeur du caractère de la représentation évaluée en cet élément.

On écrira une table de caractères sous la forme suivante :

	g_1	\dots	$g_{ G }$
χ_{π_1}	$\chi_{\pi_1}(g_1)$	\dots	$\chi_{\pi_1}(g_{ G })$
\dots	\dots	\dots	\dots
χ_{π_N}	$\chi_{\pi_N}(g_1)$	\dots	$\chi_{\pi_N}(g_{ G })$

Nous verrons plus tard que N , le nombre de représentations irréductibles de G , correspond aux nombres de classe de conjugaison de G .

Par le théorème A.2.20 des relations d'orthogonalité on a :

Proposition A.2.23. *Les lignes de la table de caractères sont orthogonales et de norme 1.*

A.2.6 Décomposition des représentations

Soit π_1, \dots, π_N les représentations irréductibles inéquivalentes de G .

Théorème A.2.24. *Soit π une représentation quelconque de G et χ_π son caractère. Alors :*

$$\pi = \bigoplus_{i=1}^N m_i \pi_i,$$

où

$$m_i = \langle \chi_{\pi_i}, \chi_\pi \rangle$$

Démonstration. D'après le théorème A.1.13 de Maschke on sait que π est en somme directe de représentations irréductibles. On regroupe les termes correspondant à une même classe d'équivalence de représentations irréductibles d'où $\pi = \bigoplus_{i=1}^N m_i \pi_i$. On alors $\chi_\pi = \sum_{i=1}^N m_i \chi_{\pi_i}$, et par orthogonalité $\langle \chi_{\pi_i}, \chi_\pi \rangle = m_i \langle \chi_{\pi_i}, \chi_{\pi_i} \rangle = m_i$ \square

Définition A.2.25. Si π , une représentation quelconque de G , admet la décomposition :

$$\pi = \bigoplus_{i=1}^N m_i \pi_i,$$

l'entier m_i est la multiplicité de π_i dans π , et $m_i \pi_i$ est la composante isotypique de type π_i de π .

Corollaire A.2.26. La décomposition en composantes isotypiques est unique à l'ordre près.

Corollaire A.2.27. Deux représentations ayant le même caractère sont équivalentes.

D'après le théorème précédent :

$$\langle \chi_\pi, \chi_\pi \rangle = \sum_{i=1}^N m_i^2$$

Donc :

Théorème A.2.28. Une représentation π est irréductible si et seulement si $\langle \chi_\pi, \chi_\pi \rangle = 1$.

A.3 La représentation régulière

A.3.1 Définition et caractère

Considérons l'action de G sur $\mathcal{F}(G)$ par

$$\forall h \in G, (g \cdot f)(h) = f(g^{-1}h)$$

Proposition A.3.1. L'action de groupe précédente définit une représentation de G dans $\mathcal{F}(G)$.

Démonstration. Soient $g_1, g_2 \in G$, $f \in \mathcal{F}$ et $h \in G$. Alors :

$$\begin{aligned} (g_1 g_2 \cdot f)(h) &= f((g_1 g_2)^{-1}h) = f(g_2^{-1} g_1^{-1}h) = (g_2 \cdot f)(g_1^{-1}h) = (g_1 \cdot (g_2 \cdot f))(h) \\ g_1 g_2 \cdot f &= g_1 \cdot (g_2 \cdot f) \end{aligned}$$

□

Définition A.3.2. Par l'action de groupe précédente, on définit la représentation régulière R , comme une représentation de G dans $\mathcal{F}(G)$, par :

$$\forall g, h \in G \forall f \in \mathcal{F}(g), (R(g)f)(h) = f(g^{-1}h).$$

Remarque A.3.3. Comme G est de dimension fini, l'espace vectoriel $\mathcal{F}(g)$ est de dimension finie $|G|$, alors la représentation régulière R est de dimension $|G|$.

On utilise la base $(e_g)_{g \in G}$ de $\mathcal{F}(G)$ définie par :

$$e_g : G \rightarrow \mathbb{C} \begin{cases} e_g(g) = 1 \\ e_h(g) = 0 \text{ si } h \neq g \end{cases}$$

La représentation régulière vérifie :

$$\forall g, h \in G, R(g)(e_h) = e_{gh}$$

Proposition A.3.4. Sur $L^2(G) = \mathcal{F}(G)$, muni du produit scalaire \langle, \rangle , la représentation régulière est unitaire.

Démonstration. Soient $f_1, f_2 \in L^2(G)$ et $g \in G$ on a :

$$\begin{aligned} \langle R(g)f_1, R(g)f_2 \rangle &= \frac{1}{|G|} \sum_{h \in G} \overline{(R(g)f_1)(h)} (R(g)f_2)(h) = \frac{1}{|G|} \sum_{h \in G} \overline{f_1(g^{-1}h)} f_2(g^{-1}h) \\ &= \frac{1}{|G|} \sum_{k \in G} \overline{f_1(k)} f_2(k) = \langle f_1, f_2 \rangle \end{aligned}$$

□

Proposition A.3.5. • $\chi_R(e) = |G|$

- $\chi_R(g) = 0$ si $g \neq e$

Démonstration. • $\chi_R(e) = \text{Tr}(R(e)) = \dim \mathcal{F}(G) = |G|$

- Soit $g \neq e$, $\chi_R(g) = \text{Tr}(R(g)) = 0$ car $R(g)e_h \neq e_h$

□

A.3.2 Décomposition en composantes isotypiques

Proposition A.3.6. *La décomposition de la représentation régulière en composantes isotypiques est $R = \bigoplus_{i=1}^N n_i \pi_i$, où $n_i = \dim \pi_i$.*

Démonstration. On sait que :

$$\chi_R(g) = \begin{cases} |G| & \text{si } g = e \\ 0 & \text{si } g \neq e \end{cases}$$

Donc $n_i = \langle \chi_R, \chi_{\pi_i} \rangle = \chi_{\pi_i}(e) = \dim \pi_i$.

□

Théorème A.3.7. *On a :*

$$\sum_{i=1}^N n_i^2 = |G| \tag{A.3.1}$$

où $n_i = \dim \pi_i$.

Démonstration. Car $|G| = \chi_R(e) = \sum_{i=1}^N n_i \chi_{\pi_i}(e) = \sum_{i=1}^N n_i^2$.

□

A.3.3 Base de l'espace vectoriel des fonctions centrales

L'espace vectoriel des fonctions centrales sur G à valeurs dans \mathbb{C} a pour dimension le nombre de classes de conjugaison de G . Soient π une représentation de G et f une fonction de G à valeurs dans \mathbb{C} . On considère l'endomorphisme π_f de E défini par :

$$\pi_f = \sum_{g \in G} f(g) \pi(g)$$

Lemme A.3.8. *L'endomorphisme π_f vérifie :*

- si f est centrale alors π_f et π commutent
- si f est centrale et π irréductible alors

$$\pi_f = \frac{|G| \langle \bar{f}, \chi_\pi \rangle}{\dim \pi} \text{Id}_E$$

Démonstration. • Soit f une fonction de G à valeurs dans \mathbb{C} on a :

$$\pi_f \circ \pi(g) = \sum_{h \in G} f(h) \pi(h) \pi(g) = \sum_{h \in G} f(h) \pi(hg) = \sum_{k \in G} f(kg^{-1}) \pi(k) = \sum_{h \in G} f(ghg^{-1}) \pi(gh)$$

Comme f est centrale alors :

$$\pi_f \circ \pi(g) = \sum_{h \in G} f(h) \pi(g) \pi(h) = \pi(g) \sum_{h \in G} f(h) \pi(h) = \pi(g) \circ \pi_f$$

- D'après le point précédent et le lemme de Schur A.1.19, il existe $\lambda \in \mathbb{C}$ tel que $\pi_f = \lambda \text{Id}_E$. De plus $\text{Tr}(\pi_f) = \sum_{g \in G} f(g) \text{Tr}(\pi(g)) = \sum_{g \in G} f(g) \chi_\pi(g) = |G| \langle \bar{f}, \chi_\pi \rangle$ ce qui montre le résultat.

□

Théorème A.3.9. *Les caractères irréductibles forment une base orthonormale de l'espace vectoriel des fonctions centrales.*

Démonstration. On sait que les caractères des représentations irréductibles inéquivalentes de G (π_1, \dots, π_N) forment un système orthonormal de $L^2(G)$. Montrons alors qu'il est complet dans le sous espace vectoriel des fonctions centrales. Soit f une fonction centrale telle que $\forall i \in \{1, \dots, N\}$, $\langle f, \chi_{\pi_i} \rangle = 0$. D'après le lemme précédent $(\pi_i)_{\bar{f}} = 0$ donc pour toute représentation π on a $\pi_{\bar{f}} = 0$. En particulier $R_{\bar{f}} = 0$, or :

$$R_{\bar{f}}(e_g) = \sum_{h \in G} \bar{f}(h)R(h)(e_g) = \sum_{h \in G} \bar{f}(h)e_{hg}.$$

En particulier :

$$R_{\bar{f}}(e_e) = \sum_{h \in G} \bar{f}(h)e_h = \bar{f}$$

donc $f = 0$. □

Corollaire A.3.10. *Le nombre de classes d'équivalence de représentations irréductibles d'un groupe fini est égal au nombre de classes de conjugaison.*

Proposition A.3.11. $|C_g|$ désigne le nombre d'éléments de la classe de conjugaison de g . Alors :

- si g et g' ne sont pas conjugués : $\sum_{i=1}^N \overline{\chi_{\pi_i}(g)}\chi_{\pi_i}(g') = 0$
- $\frac{1}{|G|} \sum_{i=1}^N \overline{\chi_{\pi_i}(g)}\chi_{\pi_i}(g) = \frac{1}{|C_g|}$

Démonstration. D'après le théorème précédent si f est centrale alors

$$f = \sum_{i=1}^N \langle \chi_{\pi_i}, f \rangle \chi_{\pi_i}.$$

Soit $g \in G$. On considère la fonction centrale f_g qui vaut 1 sur la classe d'équivalence de g et 0 ailleurs. On a :

$$\langle \chi_{\pi_i}, f_g \rangle = \frac{1}{|G|} \sum_{h \in G} \overline{\chi_{\pi_i}(h)}f_g(h) = \frac{|C_g|}{|G|} \overline{\chi_{\pi_i}(g)}.$$

donc $f_g = \frac{|C_g|}{|G|} \sum_{i=1}^N \overline{\chi_{\pi_i}(g)}\chi_{\pi_i}$.

- si $g' \notin C_g$ alors $0 = f_g(g') = \frac{|C_g|}{|G|} \sum_{i=1}^N \overline{\chi_{\pi_i}(g)}\chi_{\pi_i}(g')$
 - $1 = f_g(g) = \frac{|C_g|}{|G|} \sum_{i=1}^N \overline{\chi_{\pi_i}(g)}\chi_{\pi_i}(g)$
-

A.4 Produit deux groupes et représentations

Soient G_1 et G_2 deux groupes, considérons le groupe produit $G = G_1 \times G_2$. Soient (E_1, π_1) une représentation de G_1 et (E_2, π_2) une représentation de G_2 . On définit une représentation $\pi_1 \otimes \pi_2$ de G dans $E_1 \otimes E_2$, de manière analogue à celui du produit tensoriel, par :

$$\forall (g_1, g_2) \in G, (\pi_1 \otimes \pi_2)(g_1, g_2) = \pi_1(g_1) \otimes \pi_2(g_2).$$

Cette représentation s'appelle encore le produit tensoriel des représentations π_1 et π_2 . Et on a la relation des caractères suivante :

$$\forall (g_1, g_2) \in G, \chi_{\pi_1 \otimes \pi_2}(g_1, g_2) = \chi_{\pi_1}(g_1)\chi_{\pi_2}(g_2).$$

Théorème A.4.1. • Si π_1 et π_2 sont des représentations irréductibles alors $\pi_1 \otimes \pi_2$ est une représentation irréductible de G .

- Toute représentation irréductible de G est isomorphe à une représentation $\pi_1 \otimes \pi_2$.

Démonstration. Comme π_1 et π_2 sont irréductibles on a

$$\frac{1}{|G_1|} \sum_{g_1 \in G_1} \chi_{\pi_1}(g_1)^2 = 1 \text{ et } \frac{1}{|G_2|} \sum_{g_2 \in G_2} \chi_{\pi_2}(g_2)^2 = 1.$$

Donc :

$$\begin{aligned} \frac{1}{|G|} \sum_{g \in G} \chi_{\pi_1 \otimes \pi_2}(g)^2 &= \frac{1}{|G_1||G_2|} \sum_{(g_1, g_2) \in G} \chi_{\pi_1 \otimes \pi_2}((g_1, g_2))^2 = \frac{1}{|G_1||G_2|} \sum_{(g_1, g_2) \in G} (\chi_{\pi_1}(g_1)\chi_{\pi_2}(g_2))^2 \\ &= \frac{1}{|G_1|} \sum_{g_1 \in G_1} \chi_{\pi_1}(g_1)^2 \frac{1}{|G_2|} \sum_{g_2 \in G_2} \chi_{\pi_2}(g_2)^2 = 1 \end{aligned}$$

Donc $\pi_1 \otimes \pi_2$ est une représentation irréductible de G . Pour montrer le deuxième point il suffit de montrer que toute fonction centrale f sur G , qui est orthogonale aux caractères de la forme $\chi_{\pi_1}(g_1)\chi_{\pi_2}(g_2)$, est nulle. Supposons

$$\sum_{g_1, g_2} \overline{f(g_1, g_2)} \chi_{\pi_1}(g_1) \chi_{\pi_2}(g_2) = 0$$

En posant $h(g_1) = \sum_{g_2} \overline{f(g_1, g_2)} \chi_{\pi_2}(g_2)$, pour tout π_1 , on a :

$$\sum_{g_1} h(g_1) \chi_{\pi_1}(g_1) = 0$$

Comme g est centrale alors $g = 0$. Comme cela est vrai pour tout π_2 alors $f = 0$. \square

A.5 Opérateurs de projection

Nous allons expliciter des opérateurs de projection sur les composantes isotypiques. Soit π une représentation de G sur E et soit $\pi = \bigoplus_{i=1}^N m_i \pi_i$ la décomposition de π en composantes isotypiques. Le support de la composante isotypique $m_i \pi_i$ est $m_i E_i = E_i \oplus \dots \oplus E_i$ (m_i fois). On pose $V_i = \bigoplus_{j=1}^{m_i} E_{i,j}$ où chaque $E_{i,j}$ est égale à E_i . On a donc $E = \bigoplus_{i=1}^N V_i$.

Théorème A.5.1. *Pour tout $i \in \{1, \dots, N\}$ on pose*

$$P_i = \frac{\dim \pi_i}{|G|} \sum_{g \in G} \overline{\chi_i(g)} \pi(g).$$

- P_i est le projecteur de E sur V_i dans la décomposition $E = \bigoplus_{i=1}^N V_i$.
- $\forall i, j \in \{1, \dots, N\}$, $P_i P_j = \delta_{i,j} P_i$
- Si π est unitaire alors P_i est hermitien (${}^t \overline{P_i} = P_i$).

Démonstration. Soit $i_0 \in \{1, \dots, N\}$. Soit $x = \sum_{i=1}^N x_i$ (où $x_i \in V_i$) et $x_i = \sum_{j=1}^{m_i} x_{i,j}$ (où $x_{i,j} \in E_{i,j}$). D'où $x = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{m_i} x_{i,j}$. Alors :

$$P_{i_0}(x) = \frac{\dim \pi_{i_0}}{|G|} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{m_i} \sum_{g \in G} \overline{\chi_{i_0}(g)} \pi(g) x_{i,j} = \frac{\dim \pi_{i_0}}{|G|} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{m_i} \left(\sum_{g \in G} \overline{\chi_{i_0}(g)} \pi(g) \right) x_{i,j}$$

Comme χ_{i_0} est une fonction centrale et que π_i est irréductible en appliquant le lemme A.3.8 on a :

$$\sum_{g \in G} \overline{\chi_{i_0}(g)} \pi_i(g) = (\pi_i)_{\overline{\chi_{i_0}}} = \frac{|G|}{\dim \pi_i} \langle \chi_{i_0}, \chi_i \rangle \text{Id}_{E_i} = \frac{|G|}{\dim \pi_i} \delta_{i, i_0} \text{Id}_{E_{i_0}}.$$

Donc :

$$P_{i_0}(x) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^{m_i} \delta_{i, i_0} x_{i,j} = \sum_{j=1}^{m_{i_0}} x_{i_0, j} = x_{i_0}$$

On a la première relation et la deuxième en découle directement. Si π est unitaire alors :

$${}^t \overline{\pi_{\overline{\chi_i}}} = \sum_{g \in G} \chi_i(g) {}^t \overline{\pi(g)} = \sum_{g \in G} \chi_i(g) \pi(g^{-1}) = \sum_{g \in G} \chi_i(g^{-1}) \pi(g) = \sum_{g \in G} \overline{\chi_i(g)} \pi(g) = \pi_{\overline{\chi_i}}$$

Ce qui démontre le dernier point. \square

Remarque A.5.2. On a $\dim(\text{Im}(P_i)) = \dim(V_i) = m_i \dim(E_i) = \langle \pi, \pi_i \rangle \dim(\pi_i)$.

A.6 Exemples de table de caractères

A.6.1 Table de $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$

Le groupe $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} = \{e, c\}$ est un groupe à deux éléments qui vérifie $c^2 = e$. Comme il est d'ordre deux on ne peut pas avoir de caractère de dimension deux car sinon $\sum n_i^2 \neq |\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}|$. Donc il n'a que deux représentations irréductibles de dimension un π_1 et π_2 .

On a toujours $\chi_\pi(e) = 1$.

D'où : $1 = \chi_\pi(e) = \chi_\pi(c^2) = \chi_\pi(c)^2$. Donc $\chi_\pi(c) = \pm 1$.

La table de caractère est donc la suivante :

	e	c
χ_{π_1}	1	1
χ_{π_2}	1	-1

A.6.2 Table de D_n

Le groupe $D_n = \langle r, s \rangle$ est un groupe d'ordre $2n$ engendré par deux éléments r et s qui vérifient : $r^n = e$, $s^2 = e$ et $rs = sr^{-1}$. Regardons les cas des représentations irréductibles de dimension 1.

On a : $1 = \chi_\pi(e) = \chi_\pi(s^2) = \chi_\pi(s)^2$, donc $\chi_\pi(s) = \pm 1$.

On a : $1 = \chi_\pi(e) = \chi_\pi(rsrs^{-1}) = \chi_\pi(rrss^{-1}) = \chi_\pi(r^2)$, donc $\chi_\pi(r) = \pm 1$.

De plus $1 = \chi_\pi(e) = \chi_\pi(r^n) = \chi_\pi(r)^n$, donc si n est pair $\chi_\pi(r) = \pm 1$ et si n est impair $\chi_\pi(r) = 1$

Nous avons alors 4 représentations irréductibles de dimension 1 quand n est pair et 2 quand n est impair. Passons aux représentations irréductibles de dimension 2.

Posons $w = e^{\frac{2i\pi}{n}}$ et $h \in \mathbb{N}$. En posant pour tout h et $k \in \{0, \dots, n-1\}$

$$\pi^h(r^k) = \begin{pmatrix} w^{hk} & 0 \\ 0 & w^{-hk} \end{pmatrix}, \quad \pi^h(r^k s) = \begin{pmatrix} 0 & w^{hk} \\ w^{-hk} & 0 \end{pmatrix}$$

on définit bien des représentations π^h de dimension 2. On remarque que π^h et π^{h+n} sont les mêmes pour tous h , on peut donc se limiter à $h \in \{0, \dots, n-1\}$. De plus π^h et π^{n-h} sont isomorphes (il suffit d'intervertir les deux éléments de la base), on peut donc se limiter à $h \in \{0, \dots, \frac{n}{2}\}$.

Regardons d'abord le cas n pair. Remarquons : $\sum_{k=0}^{n-1} w^{2hk} = \begin{cases} n & \text{si } h \in \{0, \frac{n}{2}\} \\ 0 & \text{si } h \in \{1, \dots, \frac{n}{2}\} \end{cases}$

Les cas $h = 0$ et $h = \frac{n}{2}$ ne sont pas des représentations irréductibles car on a $\langle \chi_{\pi^h}, \chi_{\pi^h} \rangle = 2$.

En effet

$$\begin{aligned} \langle \chi_{\pi^h}, \chi_{\pi^h} \rangle &= \frac{1}{|D_n|} \sum_{g \in G} \chi_{\pi^h}(g)^2 = \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \chi_{\pi^h}(r^k)^2 \\ &= \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} w^{2hk} + 2 + w^{-2hk} = \frac{1}{2n} 4n = 2 \end{aligned}$$

Les cas $h \in \{1, \dots, \frac{n}{2} - 1\}$ sont des représentations irréductibles car :

$$\begin{aligned} \langle \chi_{\pi^h}, \chi_{\pi^h} \rangle &= \frac{1}{|D_n|} \sum_{g \in G} \chi_{\pi^h}(g)^2 = \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \chi_{\pi^h}(r^k)^2 \\ &= \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} w^{2hk} + 2 + w^{-2hk} = \frac{1}{2n} 2n = 1 \end{aligned}$$

De plus elles sont deux à deux non isomorphes, soit $h \neq h'$ (donc $h + h' \neq n$ et $h - h' \neq 0$) :

$$\begin{aligned} \langle \chi_{\pi^h}, \chi_{\pi^{h'}} \rangle &= \frac{1}{|D_n|} \sum_{g \in G} \chi_{\pi^h}(g) \chi_{\pi^{h'}}(g) = \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} \chi_{\pi^h}(r^k) \chi_{\pi^{h'}}(r^k) \\ &= \frac{1}{2n} \sum_{k=0}^{n-1} w^{(h+h')k} + w^{-(h+h')k} + w^{(h-h')k} + w^{(h'-h)k} = 0 \end{aligned}$$

On obtient donc, dans le cas n pair, $\frac{n}{2} - 1$ représentations irréductibles inéquivalentes de dimension 2. De plus $4 * 1^2 + (\frac{n}{2} - 1) * 2^2 = 2n = |D_n|$, donc nous les avons toutes trouvées.

Dans le cas n impair c'est similaire, on peut se restreindre à $0 \leq h \leq \frac{n}{2}$, le cas $h = 0$ est réductible et comme n est impair on peut se restreindre à $1 \leq h \leq \frac{n-1}{2}$, et dans ce cas on a des représentations irréductibles inéquivalentes. De plus $2 * 1^2 + \frac{n-1}{2} * 2^2 = 2n = |D_n|$. Donc nous les avons toutes trouvées.

Pour n pair, avec $h \in \{1, \dots, \frac{n}{2} - 1\}$, la table de caractères est :

	r^k	$r^k s$
χ_{π_1}	1	1
χ_{π_2}	1	(-1)
χ_{π_3}	$(-1)^k$	$(-1)^k$
χ_{π_4}	$(-1)^k$	$(-1)^{k+1}$
χ_{π^h}	$2 \cos \frac{2\pi h k}{n}$	0

Pour n impair, avec $h \in \{1, \dots, \frac{n-1}{2}\}$, la table de caractères est :

	r^k	$r^k s$
χ_{π_1}	1	1
χ_{π_2}	1	(-1)
χ_{π^h}	$2 \cos \frac{2\pi h k}{n}$	0

A.6.3 Table de $D_n \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$

Comme on a la table de caractères de D_n et de $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$ on obtient directement la table de $D_n \times \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$.

Pour n pair, avec $h, h' \in \{1, \dots, \frac{n}{2} - 1\}$, la table de caractères est :

	r^k	$r^k s$	$r^k c$	$r^k sc$
χ_{π_1}	1	1	1	1
χ_{π_2}	1	1	-1	-1
χ_{π_3}	1	-1	1	-1
χ_{π_4}	1	-1	-1	1
χ_{π_5}	$(-1)^k$	$(-1)^k$	$(-1)^k$	$(-1)^k$
χ_{π_6}	$(-1)^k$	$(-1)^k$	$(-1)^{k+1}$	$(-1)^{k+1}$
χ_{π_7}	$(-1)^k$	$(-1)^{k+1}$	$(-1)^k$	$(-1)^{k+1}$
χ_{π_8}	$(-1)^k$	$(-1)^{k+1}$	$(-1)^{k+1}$	$(-1)^k$
χ_{π^h}	$2 \cos \frac{2\pi h k}{n}$	0	$2 \cos \frac{2\pi h k}{n}$	0
$\chi_{\pi^{h'}}$	$2 \cos \frac{2\pi h' k}{n}$	0	$-2 \cos \frac{2\pi h' k}{n}$	0

Pour n impair, avec $h, h' \in \{1, \dots, \frac{n-1}{2}\}$, la table de caractères est :

	r^k	$r^k s$	$r^k c$	$r^k sc$
χ_{π_1}	1	1	1	1
χ_{π_2}	1	1	-1	-1
χ_{π_3}	1	-1	1	-1
χ_{π_4}	1	-1	-1	1
χ_{π^h}	$2 \cos \frac{2\pi h k}{n}$	0	$2 \cos \frac{2\pi h k}{n}$	0
$\chi_{\pi^{h'}}$	$2 \cos \frac{2\pi h' k}{n}$	0	$-2 \cos \frac{2\pi h' k}{n}$	0

Bibliographie

- [1] Svante Arrhenius. On the reaction velocity of the inversion of cane sugar by acids. *J. Phys. Chem.*, 4 :226, 1889. In German. Translated and published in : Selected Readings in Chemical Kinetics, M.H. Back and K.J. Laidler (eds.), Pergamon,Oxford, 1967.
- [2] Florent Barret. Sharp asymptotics of metastable transition times for one dimensional SPDEs. preprint [arXiv:1201.4440](https://arxiv.org/abs/1201.4440), 2012.
- [3] N. Berglund. Kramers' law : validity, derivations and generalisations. *Markov Process. Related Fields*, 19(3) :459–490, 2013.
- [4] N. Berglund and B. Gentz. The Eyring-Kramers law for potentials with nonquadratic saddles. *Markov Process. Related Fields*, 16(3) :549–598, 2010.
- [5] Nils Berglund, Bastien Fernandez, and Barbara Gentz. Metastability in interacting nonlinear stochastic differential equations : I. From weak coupling to synchronization. *Nonlinearity*, 20(11) :2551–2581, 2007.
- [6] Nils Berglund, Bastien Fernandez, and Barbara Gentz. Metastability in interacting nonlinear stochastic differential equations II : Large- N behaviour. *Nonlinearity*, 20(11) :2583–2614, 2007.
- [7] Nils Berglund and Barbara Gentz. Sharp estimates for metastable lifetimes in parabolic SPDEs : Kramers' law and beyond. *Electron. J. Probab.*, 18 :no. 24, 58, 2013.
- [8] Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gaynard, and Markus Klein. Metastability and low lying spectra in reversible Markov chains. *Comm. Math. Phys.*, 228(2) :219–255, 2002.
- [9] Anton Bovier, Michael Eckhoff, Véronique Gaynard, and Markus Klein. Metastability in reversible diffusion processes. I. Sharp asymptotics for capacities and exit times. *J. Eur. Math. Soc. (JEMS)*, 6(4) :399–424, 2004.
- [10] Anton Bovier, Véronique Gaynard, and Markus Klein. Metastability in reversible diffusion processes. II. Precise asymptotics for small eigenvalues. *J. Eur. Math. Soc. (JEMS)*, 7(1) :69–99, 2005.
- [11] M. Cameron. Computing the asymptotic spectrum for networks representing energy landscapes using the minimal spanning tree. *Preprint*, arxiv :1402.2869, 2014.
- [12] Maria Cameron and Eric Vanden-Eijnden. Flows in complex networks : theory, algorithms, and application to Lennard-Jones cluster rearrangement. *J. Stat. Phys.*, 156(3) :427–454, 2014.
- [13] F. den Hollander. Metastability under stochastic dynamics. *Stochastic Processes and their Applications*, 114(1) :1–26, 2004.
- [14] M. D. Donsker and S. R. S. Varadhan. On the principal eigenvalue of second-order elliptic differential operators. *Comm. Pure Appl. Math.*, 29(6) :595–621, 1976.
- [15] H. Eyring. The activated complex in chemical reactions. *Journal of Chemical Physics*, 3 :107–115, 1935.
- [16] M. I. Freidlin and A. D. Wentzell. *Random perturbations of dynamical systems*, volume 260 of *Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences]*. Springer-Verlag, New York, 1984. Translated from the Russian by Joseph Szücs.

- [17] David Gilbarg and Neil S. Trudinger. *Elliptic partial differential equations of second order*, volume 224 of *Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften [Fundamental Principles of Mathematical Sciences]*. Springer-Verlag, Berlin, second edition, 1983.
- [18] S. Glasstone, K.J. Laidler, and H. Eyring. *The Theory of Rate Processes : The Kinetics of Chemical Reactions, Viscosity, Diffusion and Electrochemical Phenomena*. International chemical series. McGraw-Hill Book Company, Incorporated, 1941.
- [19] Gene H. Golub and Charles F. Van Loan. *Matrix computations*. Johns Hopkins Studies in the Mathematical Sciences. Johns Hopkins University Press, Baltimore, MD, third edition, 1996.
- [20] Xavier Gourdon. *Les Maths en tête - Algèbre*. Ellipses, 2009.
- [21] Bernard Helffer, Markus Klein, and Francis Nier. Quantitative analysis of metastability in reversible diffusion processes via a Witten complex approach. *Mat. Contemp.*, 26 :41–85, 2004.
- [22] C.-R. Hwang and S.J. Sheu. Singular perturbed markov chains and the exact behaviors of simulated annealing processes. *J. Theoretical Probab.*, 5(2) :223–249, 1992.
- [23] Vassili N. Kolokoltsov. *Semiclassical analysis for diffusions and stochastic processes*, volume 1724 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer-Verlag, Berlin, 2000.
- [24] Vassili N. Kolokol'tsov and Konstantin A. Makarov. Asymptotic spectral analysis of a small diffusion operator and the life times of the corresponding diffusion process. *Russian J. Math. Phys.*, 4(3) :341–360, 1996.
- [25] Yvette Kosmann-Schwarzbach. *Groupes et symétries : Groupes finis, groupes et algèbres de Lie, représentations*. Les éditions de l'école polytechnique, 2005.
- [26] H. A. Kramers. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. *Physica*, 7 :284–304, 1940.
- [27] Yves Le Jan. *Markov paths, loops and fields*, volume 2026 of *Lecture Notes in Mathematics*. Springer, Heidelberg, 2011. Lectures from the 38th Probability Summer School held in Saint-Flour, 2008.
- [28] Dorian Le Peutrec, Francis Nier, and Claude Viterbo. Precise Arrhenius law for p -forms : the Witten Laplacian and Morse-Barannikov complex. *Ann. Henri Poincaré*, 14(3) :567–610, 2013.
- [29] Robert S. Maier and Daniel L. Stein. Limiting exit location distributions in the stochastic exit problem. *SIAM J. Appl. Math.*, 57(3) :752–790, 1997.
- [30] Pierre Mathieu. Spectra, exit times and long time asymptotics in the zero-white-noise limit. *Stochastics Stochastics Rep.*, 55(1-2) :1–20, 1995.
- [31] Laurent Miclo. Comportement de spectres d'opérateurs de Schrödinger à basse température. *Bull. Sci. Math.*, 119(6) :529–553, 1995.
- [32] Frédéric Pham. *Géométrie et calcul différentiel sur les variétés*. Dunod, 1999.
- [33] L. C. G. Rogers and David Williams. *Diffusions, Markov processes, and martingales. Vol. 2*. Cambridge Mathematical Library. Cambridge University Press, Cambridge, 2000. Itô calculus, Reprint of the second (1994) edition.
- [34] F. Rouvière. *Petit guide de calcul différentiel : à l'usage de la licence et de l'agrégation*. Enseignement des mathématiques. Cassini, 2009.
- [35] H. Rutishauser. Handbook series linear algebra : The jacobi method for real symmetric matrices. *Numer. Math.*, 9(1) :1–10, 1966.
- [36] Jean-Pierre Serre. *Linear representations of finite groups*. Springer-Verlag, New York-Heidelberg, 1977. Translated from the second French edition by Leonard L. Scott, Graduate Texts in Mathematics, Vol. 42.
- [37] A. D. Ventcel'. The asymptotic behavior of the eigenvalues of matrices with elements of the order $\exp\{-V_{ij}/(2\varepsilon^2)\}$. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 202 :263–265, 1972.
- [38] A. D. Ventcel' and M. I. Freĭdlin. Small random perturbations of a dynamical system with stable equilibrium position. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 187 :506–509, 1969.
- [39] A. D. Ventcel' and M. I. Freĭdlin. Small random perturbations of dynamical systems. *Uspehi Mat. Nauk*, 25(1 (151)) :3–55, 1970.

Sébastien DUTERCQ
Métastabilité dans les systèmes avec lois de conservation

Résumé :

Cette thèse porte sur l'étude du phénomène de métastabilité, modélisé par l'équation différentielle stochastique

$$dX_\epsilon(t) = -\nabla V(X_\epsilon(t))dt + \sqrt{2\epsilon}dW(t),$$

sur un domaine régulier $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, où le gradient ∇V est généré par une fonction potentielle $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ et $dW(t)$ est le mouvement Brownien standard de dimension d . Ce type d'équation étant déjà très largement étudié dans le cas d'un potentiel sans symétries, cette étude se concentrera alors sur le cas de potentiels avec symétries. On utilise la théorie des représentations des groupes finis pour obtenir des résultats analogues à ceux du cas de potentiels sans symétries sur les temps de transition et les valeurs propres du générateur. Pour illustrer la théorie développée, on considérera le potentiel

$$V_\gamma(x) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^d x_i^4 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d x_i^2 + \frac{\gamma}{4} \sum_{i=1}^d (x_{i+1} - x_i)^2, \text{ avec la loi de conservation } \sum_{i=1}^d x_i = 0.$$

Ce système décrit un ensemble de particules bistables en interaction.

Mots clés : Métastabilité, loi de Kramers, groupe de symétrie, théorie spectrale, processus de saut Markoviens et de diffusion, théorie des représentations des groupes finis, théorie du potentiel, temps de premier passage.

Metastability in systems with conservation laws

Abstract :

This thesis studies the phenomenon of metastability, modeled by the stochastic differential equation

$$dX_\epsilon(t) = -\nabla V(X_\epsilon(t))dt + \sqrt{2\epsilon}dW(t),$$

on a regular domain $\Omega \subseteq \mathbb{R}^d$, where the drift ∇V is generated by a potential function $V : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ and $dW(t)$ is a standard d -dimensional Brownian motion. This class of equation having already been widely studied in the case of a non-symmetric potential, this study will focus on the case of symmetric potentials. Representation theory of finite groups is used to get results similar to those of the case of a non-symmetric potential on transition's times and generator's eigenvalues. To illustrate the theory developed, we will consider the potential

$$V_\gamma(x) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^d x_i^4 - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d x_i^2 + \frac{\gamma}{4} \sum_{i=1}^d (x_{i+1} - x_i)^2, \text{ with conservation law } \sum_{i=1}^d x_i = 0.$$

This system describes a set of bistable interacting particles.

Keywords : Metastability, Kramers' law, Markovian jump process, diffusion process, spectral theory, symmetry group, representation theory, potential theory, first-passage time.



MAPMO UMR 7349, Fédération Denis Poisson
Université d'Orléans, UFR Sciences
Bâtiment de mathématiques - Route de Chartres
B.P. 6759 - 45067 Orléans cedex 2
FRANCE

