N° d'ordre : 4098

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I

ÉCOLE DOCTORALE DE MATHÉMATIQUES ET INFORMATIQUE

par **Sofiane AKKOUCHE**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : **Mathématiques Pures**

****

SUR LA THEORIE SPECTRALE DES OPERATEURS DE SCHRÖDINGER DISCRETS

****

Soutenue le Vendredi 19 novembre 2010

Après avis de :

J. VON BELOW	Professeur, Université du Littoral Côte d'Opale	Rapporteur
V. GEORGESCU	Directeur de Recherche CNRS, Université de Cergy-Pontoise	Rapporteur

Devant la commission d'examen formée de :

A. BACHELOT	Professeur, Université Bordeaux 1	Président
J. VON BELOW	Professeur, Université du Littoral Côte d'Opale	
V. GEORGESCU	Directeur de Recherche CNRS, Université de Cergy-Pontoise	
S. KUPIN	Professeur, Université Bordeaux 1	Rapporteur
E.M. OUHABAZ	Professeur, Université Bordeaux 1	Directeur
E. RUSS	Maître de Conférences, Université Aix-Marseille 3	

-2010-

N° d'ordre : 4098

THÈSE

présentée à

L'UNIVERSITÉ BORDEAUX I

ÉCOLE DOCTORALE DE MATHÉMATIQUES ET INFORMATIQUE

par **Sofiane AKKOUCHE**

POUR OBTENIR LE GRADE DE

DOCTEUR

SPÉCIALITÉ : **Mathématiques Pures**

****

SUR LA THEORIE SPECTRALE DES OPERATEURS DE SCHRÖDINGER DISCRETS

****

Soutenue le Vendredi 19 novembre 2010

Après avis de :

J. VON BELOW	Professeur, Université du Littoral Côte d'Opale	Rapporteur
V. GEORGESCU	Directeur de Recherche CNRS, Université de Cergy-Pontoise	Rapporteur

Devant la commission d'examen formée de :

A. BACHELOT	Professeur, Université Bordeaux 1	Président
J. VON BELOW	Professeur, Université du Littoral Côte d'Opale	
V. GEORGESCU	Directeur de Recherche CNRS, Université de Cergy-Pontoise	
S. KUPIN	Professeur, Université Bordeaux 1	Rapporteur
E.M. OUHABAZ	Professeur, Université Bordeaux 1	Directeur
E. RUSS	Maître de Conférences, Université Aix-Marseille 3	

-2010-

Remerciements

En tout premier lieu, je tiens à exprimer mes sincères remerciements à mon directeur de thèse, El Maati Ouhabaz. Autant sur le plan des mathématiques que sur le plan humain, sa disponibilité, ses conseils et ses réponses m'ont beaucoup aidé pendant ces trois années. Je le remercie également pour m'avoir proposé un sujet de recherche intéressant en tenant compte de mon parcours et pour la confiance qu'il m'a accordée. J'espère en avoir été digne.

Je remercie Joachim von Below et Vlamdimir Georgescu d'avoir accepté de rapporter cette thèse et de faire partie de mon jury. Leurs précieuses remarques m'ont permis d'améliorer la qualité de ce manuscrit. Merci également à Alain Bachelot, Stanislas Kupin et Emmanuel Russ qui ont accepté de faire partie de mon jury.

Je tiens aussi à remercier l'ensemble de l'équipe d'analyse de l'IMB et plus particulièrement les membres du groupe de travail d'analyse. Merci à Etienne Matheron et à Mohamed Zarrabi pour avoir organisé les séances pendant lesquelles j'ai pu exposer mes travaux. Merci à Frédéric Bayart, Jean-François Bony et Sylvain Golenia pour leurs précieuses remarques qui ont fait considérablement avancer mon travail.

Je remercie chaleureusement les professeurs Bernard de Mathan, Jean Fresnel, Michel Matignon et Etienne Matheron qui ont été d'excellents enseignants lors de ma préparation à l'agrégation. Je leur dois beaucoup dans ma formation et dans la poursuite de mes études.

Merci à Rachid et Stéphane pour leur sens de l'humour et la bonne humeur permanente dans le bureau. Merci à Fred et Nelly pour tout ce qu'on a partagé pendant ces trois années. Je leur souhaite bon courage pour la suite.

Une pensée pour ma famille et mes amis qui m'ont honoré de leur présence le jour de la soutenance. Une pensée particulère pour ma soeur Sabrina qui s'est également lancée dans une thèse et à qui je souhaite beaucoup de réussite. Je n'oublie pas non plus mon frère Mehdi qui a très bien compris que la somme des forces était nulle et pour son talent de vulgarisation de mes travaux.

Enfin, ce travail n'aurait jamais vu le jour sans les encouragements permanents de mes parents à aller toujours plus loin. Je les en remercie profondément et je leur dédie cette thèse en signe de reconnaissance.

Mes derniers remerciements mais pas les moindres vont à Sandra qui par sa présence et son soutien quotidiens a su rendre ces trois années si agréables.

A mes parents,

Table des matières

Chapitre 1

Introduction

Cette thèse a pour cadre général la théorie spectrale des opérateurs de Schrödinger discrets sur $\mathbb{Z}^d$ et plus généralement sur un graphe pondéré infini. Elle réunit trois travaux qui s'inspirent de résultats connus pour l'opérateur de Schrödinger continu sur $\mathbb{R}^d$ ou sur une variété Riemannienne non compacte. Les deux premiers portent sur l'étude des fonctions spectrales, c'est à dire les bornes du spectre de l'opérateur de Schrödinger discret et s'intéressent plus particulièrement à la positivité du bas du spectre. Le troisième, qui est en cours de finalisation, donne une minoration du bas du spectre essentiel. Nous reviendrons en détail sur nos résultats dans cette introduction.

L'équation de Schrödinger, qui décrit l'évolution d'un système quantique soumis à un potentiel V, est un des fondements de la mécanique quantique. L'opérateur $H = -\Delta + V$ associé est appelé opérateur de Schrödinger. L'opérateur $\Delta = \sum_{i=1}^{d} \frac{\partial_i^2}{\partial x_i^2}$ représente le laplacien et l'opérateur de multiplication V est appelé le potentiel associé à l'opérateur de Schrödinger. Nous travaillons dans cette thèse avec la version discrète (ou combinatoire) de ces opérateurs. Nous verrons plus loin comment les définir sur les graphes ou sur $\mathbb{Z}^d$. Le passage du modèle continu au modèle discret est motivé par le lien étroit qui existe entre les graphes et les variétés Riemanniennes. En effet, une variété Riemannienne M peut être discrétisée sous la forme d'un graphe X et la géométrie de X est alors une bonne approximation de la géométrie de M. Cette idée de discrétisation a d'abord été développée par Furstenberg [Fu] puis utilisée chez de nombreux auteurs (par exemple [LS], [Va], [Co]) pour établir des parallèles entre ces deux objets autant dans le domaine probabiliste qu'en théorie du potentiel. D'autre part, de nombreux travaux utilisent cette discrétisation pour étudier le spectre du laplacien sur la variété Riemannienne (par exemple [Br], [DP], ou plus récemment [Ma]). Il est donc naturel de penser que les propriétés spectrales de l'opérateur de Schrödinger sur une variété Riemannienne (ou dans $\mathbb{R}^d$) doivent se retrouver dans le cadre discret des graphes (ou dans $\mathbb{Z}^d$). Notons que certains auteurs se sont intéressés à l'étude du laplacien sur les réseaux considérés comme des graphes topologiques dans l'espace euclidien $\mathbb{R}^d$ ([Ro], [B1], [B2], [BL]) et à la théorie du potentiel dans le cas des réseaux ([B3], [Mu]). Dans ce cas, chaque arête du graphe est identifiée à un intervalle de $\mathbb{R}^d$ et on peut alors définir un laplacien continu sur le réseau.

Les travaux de [B2] et [BL] établissent alors un lien entre le spectre du laplacien continu sur le graphe topologique et l'opérateur d'adjacence du graphe abstrait. Ce dernier opérateur étant en lien étroit avec le laplacien combinatoire, surtout dans le cas régulier, l'étude spectrale de ces opérateurs est intéressante pour le traitement du laplacien continu. Par exemple, on peut obtenir la valeur du bas du spectre dans le cas continu grâce au graphe abstrait. Récemment, les résultats de [B4] sur le rayon spectral de l'opérateur d'adjacence s'appliquent également.

Avant de présenter nos travaux, nous établissons un état des lieux des résultats qui nous intéressent sur le spectre des opérateurs de Schrödinger dans le cadre continu.

Soit A un opérateur auto-adjoint. Son spectre, noté $\sigma(A)$ est une partie non vide de $\mathbb{R}$. Le spectre discret, composé de valeurs propres de multiplicité finie, est noté $\sigma_{disc}(A)$. L'autre composante du spectre constitue le spectre essentiel noté $\sigma_{ess}(A)$ de telle manière que $\sigma(A) = \sigma_{disc}(A) \cup \sigma_{ess}(A)$. D'autre part, on note $s(A) := \inf \sigma(A)$ le bas du spectre et $M(A) := \sup \sigma(A)$ le haut du spectre. De même, $s_{ess}(A) := \inf \sigma_{ess}(A)$ et $M_{ess}(A) := \sup \sigma_{ess}(A)$. On considère à présent le laplacien positif $-\Delta := -\sum_{i=1}^{d} \frac{\partial_i^2}{\partial x_i^2}$ avec domaine $H^2(\mathbb{R}^d) := \left\{u \in L^2(\mathbb{R}^d), \Delta u \in L^2(\mathbb{R}^d)\right\}$. Il s'agit d'un opérateur auto-adjoint et une transformation de Fourier montre que $\sigma(-\Delta) = \sigma_{ess}(-\Delta) = [0, +\infty)$. Ainsi, $s(-\Delta) = 0$ dans le cas euclidien.
Pour un potentiel positif et borné $V \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$, on définit l'opérateur de Schrödinger $H(\lambda) := -\Delta + \lambda V$ où λ est un réel positif appelé constante de couplage. L'opérateur $H(\lambda)$ est auto-adjoint et on appelle fonction spectrale la fonction réelle $s(\lambda) := s(H(\lambda))$ représentant le bas du spectre. Elle est caractérisée par le principe du Min-Max (voir [RS] par exemple) grâce à la formule variationnelle suivante

$$s(\lambda) = \inf_{\substack{u \in D(H(\lambda)) \\ ||u||=1}} \langle H(\lambda)u, u\rangle = \inf_{\substack{u \in D(H(\lambda)) \\ ||u||=1}} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u|^2 + \int_{\mathbb{R}^d} V u^2 \tag{1.1}$$

où $\langle ., . \rangle$ représente le produit scalaire sur $L^2(\mathbb{R}^d)$.

Pour des potentiels plus généraux de la forme $V = V^+ - V^-$, on construit l'opérateur de Schrödinger $H(\lambda) = -\Delta + \lambda V$ par la méthode des formes quadratiques (voir [Ou2]) de la manière suivante. Pour $V^+ \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^d)$, on définit la forme bilinéaire

$$\mathfrak{a}^+(u, v) = \int_{\mathbb{R}^d} \nabla u \nabla v + \lambda \int_{\mathbb{R}^d} V^+ uv,$$

avec domaine

$$D\left(\mathfrak{a}^+\right) = \left\{u \in H^1(\mathbb{R}^d) \text{ tel que } \int_{\mathbb{R}^d} V^+ u^2 < \infty\right\}.$$

La forme $\mathfrak{a}^+$ est à domaine dense, symétrique, accrétive et fermée. On peut donc lui associer un opérateur auto-adjoint A^+ avec domaine

$$D(A^+) = \{u \in D\left(\mathfrak{a}^+\right) : \exists f \in L^2(\mathbb{R}^d) \text{ tel que}$$
$$\int_{\mathbb{R}^d} \nabla u \nabla v + \lambda \int_{\mathbb{R}^d} V^+ uv = \int_{\mathbb{R}^d} fv, \forall v \in D\left(\mathfrak{a}^+\right)\}$$

et $A^+u = f$. L'opérateur $-\Delta + \lambda V^+$ est alors défini comme étant l'opérateur A^+ associé à $\mathfrak{a}^+$. Pour intégrer la partie négative du potentiel, on introduit la forme

$$\mathfrak{a}^-(u,v) = \lambda \int_{\mathbb{R}^d} V^- uv,$$

avec domaine $D\left(\mathfrak{a}^-\right) = D\left(\mathfrak{a}^+\right)$ et vérifiant pour tout $x \in D\left(\mathfrak{a}^+\right)$

$$\left|\mathfrak{a}^-(x,x)\right| \leq \alpha \mathfrak{a}^+(x,x) + \beta \left\langle x,x \right\rangle,$$

pour $0 < \alpha < 1$ et $\beta \in \mathbb{R}$. La forme $\mathfrak{a} = \mathfrak{a}^+ - \mathfrak{a}^-$ a pour domaine $D(\mathfrak{a}) = D(\mathfrak{a}^+)$ et on peut alors associer à un opérateur auto-adjoint A par le théorème KLMN (voir [Ou2]). L'opérateur de Schrödinger $H(\lambda) = -\Delta + \lambda(V^+ - V^-)$ est défini comme étant cet opérateur A. La fonction spectrale $s(\lambda)$ est définie de la même manière et on a de plus la caractérisation variationnelle

$$s(\lambda) = \inf_{\substack{u \in D(\mathfrak{a}^+) \\ ||u||=1}} \mathfrak{a}(u,u) = \inf_{\substack{u \in D(\mathfrak{a}^+) \\ ||u||=1}} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u|^2 + \int_{\mathbb{R}^d} Vu^2.$$

Le bas du spectre $s(\lambda)$ joue un rôle important dans les équations de Schrödinger. En effet, la stricte positivité du bas du spectre assure une décroissance exponentielle en temps de la solution de l'équation de Schrödinger

$$\begin{cases} \frac{\partial u(t,.)}{\partial t} = \Delta u\left(t,.\right) - Vu\left(t,.\right), \, t > 0 \\ \\ u\left(0,.\right) = f \in L^2\left(\mathbb{R}^d\right). \end{cases}$$

Cette question a été étudiée par de nombreux auteurs dans le but de caractériser les potentiels pour lesquels $s(\lambda) > 0$ pour $\lambda > 0$. Les premiers résultats sont obtenus dans le cas particulier des potentiels périodiques en une dimension (voir par exemple [Wi], [Mo]) puis des potentiels plus généraux sont considérés dans [GGS] où les auteurs donnent des conditions suffisantes sur le potentiel pour assurer la stricte positivité de $s(\lambda)$.

Avant de donner le résultat dans le cas euclidien, remarquons tout d'abord que la positivité du potentiel ne garantit pas la stricte positivité du bas du spectre. Par exemple, pour un potentiel positif à support compact, il est facile de vérifier à partir de la formule variationnelle (1.1) que $s(\lambda) = 0$ pour tout $\lambda \geq 0$. Ainsi, le potentiel doit avoir une contribution dans tout l'espace dans un certain sens. La condition nécessaire et suffisante donnée par W. Arendt et C. Batty dans [AB1] confirme cette intuition. En effet, pour des potentiels bornés et positifs $V \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$, ils montrent que $s(\lambda) > 0$ pour $\lambda > 0$ si et seulement si le potentiel V vérifie la condition (M_R) suivante pour un certain $R > 0$.

$$\exists R > 0 \text{ tel que } \inf_{x\in\mathbb{R}^d} \int_{B(x,R)} V > 0. \tag{M_R}$$

L'hypothèse de bornitude sur le potentiel est cruciale et la condition (M_R) n'est plus suffisante pour des potentiels $V \in L^1_{loc}(\mathbb{R}^d)$ pour $d \geq 2$. Cependant, une autre condition nécessaire et suffisante est donnée dans [AB1] et [Ba] pour les potentiels non bornés. Nous insistons sur ce point car il constitue une des différences essentielles avec le cas discret pour lequel une condition du type (M_R) reste valide pour des potentiels non bornés. Ce résultat est le point de départ de notre étude sur les fonctions spectrales de l'opérateur de Schrödinger discret sur $\mathbb{Z}^d$. Nous reviendrons plus loin sur les résultats de cette étude qui constitue le chapitre 3 de cette thèse.

Pour une variété Riemannienne M, on considère l'opérateur de Laplace-Beltrami positif $-\Delta$. Il est auto-adjoint sur $L^2(M)$ et $\sigma(-\Delta) \subset [0, +\infty)$. L'inclusion peut être stricte en fonction de la géométrie de la variété et on peut donc avoir $s(-\Delta) > 0$ contrairement au cas euclidien. Pour un potentiel V positif et borné, on définit l'opérateur de Schrödinger $H(\lambda) := -\Delta + \lambda V$ sur M et on pose la question de la stricte positivité de $s(\lambda)$ dans ce cadre. E.M Ouhabaz donne dans [Ou1] une généralisation du résultat précédent de [AB1] pour des variétés Riemanniennes satisfaisant le doublement local $(D(R))$ et les inégalités de Poincaré L^2 sur les boules $(PI(R))$ pour un certain $R > 0$.

Il existe $R > 0$ et $C_1 > 0$ tels que pour tout $r \leq R$,

$$|B(x, 2r)| \leq C_1 |B(x, r)|. \tag{$D(R)$}$$

Il existe $R > 0$ et $C_2 > 0$ tels que pour tout $r \leq R$ et pour tout $x \in M$,

$$\int_{B(x,r)} |u - u_{B(x,r)}|^2 \leq C_2 r^2 \int_{B(x,r)} |\nabla u|^2, \tag{$PI(R)$}$$

où $u_{B(x,r)}$ est la moyenne de u sur la boule.

Précisément, il montre que pour de telles variétés, la condition (M'_R) suivante est suffisante pour assurer la stricte positivité de $s(\lambda)$ pour $\lambda > 0$.

$$\exists R > 0 \text{ tel que } \inf_{x\in M} \frac{1}{|B(x,R)|} \int_{B(x,R)} V > 0, \tag{M'_R}$$

où $|B(x, R)|$ désigne le volume de la boule. D'autre part, il montre que cette condition devient nécessaire si on ajoute une hypothèse de croissance sur les boules.

La preuve de ce résultat, dont nous nous inspirons pour traiter le cas discret, consiste à recouvrir l'espace par des boules de rayon fixé puis de considérer le laplacien de Neumann sur ces boules. Les inégalités de Poincaré permettent ensuite d'obtenir une minoration uniforme du bas du spectre de laplacien de Neumann sur chaque boule. L'uniformité et le bon recouvrement de l'espace donnent alors le résultat.

D'autre part, l'auteur considère également des potentiels bornés de signe quelconque $V = V^+ - V^-$ tels que V^- tend vers 0 en l'infini. Lorsque la partie négative du potentiel est non triviale, il est clair que $s(\lambda) \underset{\lambda\to+\infty}{\longrightarrow} -\infty$. Cependant, [Ou1] montre que si la partie positive du potentiel V^+ vérifie la condition (M'_R) alors il existe $\epsilon > 0$ tel que

$$s(\lambda) > 0 \text{ pour tout } \lambda \in (0, \epsilon).$$

Enfin, remarquons que dans le cas de potentiels positifs, Z. Shen [Sh] démontre le même type de résultat sous d'autres hypothèses n'imposant pas au potentiel V d'être borné. La version discrète de ces résultats sera étudiée dans le chapitre 4 qui traite du spectre de l'opérateur de Schrödinger sur les graphes infinis pondérés.

Le chapitre 3, qui correspond à l'article [Ak], étudie les fonctions spectrales de l'opérateur de Schrödinger discret sur $\mathbb{Z}^d$. Certaines similarités avec le cas continu nous permettent d'obtenir la version discrète du résultat donné dans [AB1]. D'autre part, des propriétés propres au cas discret engendrent de nouveaux résultats. Rappelons tout d'abord la définition du laplacien discret $-\Delta_P$ sur $\ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right)$, aussi appelé laplacien physique. Pour tout $n \in \mathbb{Z}^d$,

$$-\Delta_P\,(u)\,(n) := \sum_{\substack{m\in\mathbb{Z}^d\\ |m-n|=1}} (u_n - u_m) := 2du_n - \sum_{\substack{m\in\mathbb{Z}^d\\ |m-n|=1}} u_m.$$

Nous renvoyons au chapitre 2 pour les détails concernant les différents type de laplacien et l'étude de leurs propriétés. L'opérateur $-\Delta_P$ est borné et auto-adjoint sur $\ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right)$ et une transformation de Fourier donne $\sigma\left(-\Delta_P\right) = \sigma_{ess}\left(-\Delta_P\right) = [0, 4d]$. Une première différence avec le cas continu apparaît avec le caractère borné du laplacien et en particulier le fait que le spectre du laplacien discret possède deux extrémités. Nous verrons que cette particularité permet d'obtenir des résultats spécifiques au cas discret. Pour un potentiel $b : \mathbb{Z}^d \longrightarrow \mathbb{R}$ et une constante de couplage $\lambda \geq 0$, l'opérateur de Schrödinger discret $H(\lambda) := -\Delta_P + \lambda b$ avec domaine $D(H(\lambda)) = D(b) = \left\{u \in \ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right), \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} b_n u_n^2 < +\infty\right\}$ est un opérateur auto-adjoint univoquement défini. Cela résulte du fait que Δ_P est un opérateur borné et que b est un opérateur auto-adjoint. On note alors $s(\lambda) := \inf \sigma(H(\lambda))$ et $M(\lambda) := \sup \sigma(H(\lambda))$ les bornes de son spectre, qui sont caractérisées par le principe du Min-Max.

$$s(\lambda) = \inf_{\substack{u\in D(H(\lambda))\\ ||u||=1}} \langle H(\lambda)u, u\rangle \text{ et } M(\lambda) = \sup_{\substack{u\in D(H(\lambda))\\ ||u||=1}} \langle H(\lambda)u, u\rangle\,, \tag{1.2}$$

où $\langle .,. \rangle$ représente le produit scalaire sur $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$. La condition assurant la stricte positivité du bas du spectre est du même type que celle définie dans le cas continu. Avec les notations de la définition 3.3.1 du chapitre 3, on dira que le potentiel b satisfait la condition $(M_{\delta,N})$ si

$$\text{il existe } \delta > 0 \text{ et } N \in \mathbb{N} \text{ tels que } \sum_{i=k}^{k+N-1} b_i \geq \delta \text{ pour tout } k \in \mathbb{Z}^d. \qquad (M_{\delta,N})$$

On prouve alors le résultat suivant.

Theorem 1.0.1. *Les assertions suivantes sont équivalentes.*

1. $s(\lambda) > 0$ *pour tout* $\lambda \in (0, \epsilon)$ *pour un certain* $\epsilon > 0$
2. *le potentiel* $b = b^+ - b^-$ *est borné inférieurement et satisfait la condition* $(M_{\delta,N})$.

En particulier, si le potentiel $b = b^+$ *est positif, les assertions suivantes sont équivalentes.*

1'. $s(\lambda) > 0$ *pour tout* $\lambda > 0$

2'. *le potentiel* $b = b^+$ *satisfait la condition* $(M_{\delta,N})$.

L'idée de la preuve du Théorème 1.0.1 est de découper le réseau $\mathbb{Z}^d$ avec des cubes disjoints de taille finie fixée. On se ramène ainsi à l'étude de restrictions de l'opérateur sur des espaces de dimension finie. On utilise ensuite la condition sur le potentiel pour obtenir une minoration uniforme de la plus petite valeur propre sur chaque cube. L'uniformité et le découpage de l'espace permettent alors de minorer le bas du spectre de l'opérateur initial. Même si les techniques sont différentes, l'idée générale de la preuve se rapproche de celle donnée dans [Ou1]. Cependant, les spécificités du cas discret apportent plusieurs améliorations par rapport au cas continu.

Tout d'abord, le résultat dans le cas discret reste valable pour des potentiels non bornés contrairement au cas continu. Ceci est fortement lié au caractère discret de l'espace $\mathbb{Z}^d$. En effet, le passage du cas borné ou cas non borné utilise un argument de troncature du potentiel. Ceci est possible car la mesure du support d'une fonction sur $\mathbb{Z}^d$ n'intervient pas dans les calculs contrairement au cas continu. Ainsi, on peut s'arranger pour que le potentiel tronqué vérifie toujours la condition $(M_{\delta,N})$.

D'autre part, le résultat dans le cas discret reste valable pour des potentiels $b = b^+ - b^-$ sans hypothèses sur le comportement de b^- en l'infini. En effet, la régularité du réseau $\mathbb{Z}^d$ permet de faire une partition minutieuse de l'espace de manière à garder toute l'information sur le potentiel et d'obtenir ainsi un résultat plus précis. Dans le cas des variétés Riemanniennes et des graphes, une telle méthode n'est plus applicable en général par manque de régularité d'où l'hypothèse imposée à la partie négative du potentiel et on ne sait pas si le résultat reste vrai sans cette hypothèse supplémentaire.

Enfin, l'étude du haut du spectre $M(\lambda)$ est une spécificité du cas discret. Elle est cependant facilitée par la relation

$$M(-\Delta + \lambda b) = 4d - s(-\Delta - \lambda b),$$

que l'on obtient aisément en utilisant l'opérateur unitaire $U\phi(n) = (-1)^{|n|}\phi(n)$. On obtient ainsi un résultat similaire au Théorème 1.0.1 pour le haut du spectre qui permet alors de montrer la relation suivante.

Proposition 1.0.2.

$$M(\lambda) - s(\lambda) \geq 4d \text{ pour tout } \lambda \geq 0. \tag{1.3}$$

Ce dernier résultat est à rapprocher des travaux de R. Killip et B.Simon sur les matrices de Jacobi ([KS]) complétés par ceux de D. Damanik, D. Hundertmark, R. Killip et B. Simon sur les opérateurs de Schrödinger discrets ([DHKS]). En effet, dans [DHKS], les auteurs montrent que l'inégalité dans la relation 1.3 est stricte pour les dimensions $d = 1$ et $d = 2$ dès lors que le potentiel b est non identiquement nul tandis que pour les dimensions $d \geq 3$, l'égalité peut avoir lieu. En d'autres termes, le théorème suivant montre qu'en dimension 1 et 2 le seul opérateur de Schrödinger dont le spectre est inclus dans $[0, 4d]$ est le laplacien.

Theorem 1.0.3. *([DHKS],2003) Pour $d = 1, 2$, si $\sigma(H(\lambda)) \subset [0, 4d]$ alors $b \equiv 0$.*

Nous donnons une preuve simple de ce résultat à la fin du chapitre 3. Avant de passer au cas des graphes, signalons le lien étroit entre l'étude des opérateurs de Schrödinger sur $\mathbb{Z}$ et les matrices de Jacobi sur $\ell^2(\mathbb{Z})$ qui ont été très étudiées ces dernières décennies (voir [Te] à ce sujet). Nous y reviendrons à titre d'exemple au cours de cette thèse.

Le chapitre 4 concerne l'étude du spectre de l'opérateur de Schrödinger sur un graphe pondéré et comporte deux parties indépendantes. La première partie, qui traite des bornes du spectre de l'opérateur de Schrödinger discret sur un graphe, peut être vue comme une généralisation des résultats du chapitre 3. La seconde partie traite du comportement asymptotique de la fonction spectrale $s(\lambda)$.

Pour faciliter la lecture de cette section, nous introduisons au chapitre 2 les concepts de base sur les graphes ainsi que des résultats utiles pour la compréhension de nos travaux. En particulier, les notations utilisées dans cette introduction y sont définies. Pour un graphe pondéré $G = (V, E, \mu)$ donné, on considère le laplacien combinatoire

$$-\Delta f(x) = f(x) - \frac{1}{\mu(x)} \sum_{y \sim x} f(y)\mu_{xy} = \frac{1}{\mu(x)} \sum_{y \sim x} (f(x) - f(y))\mu_{xy}$$

qui est un opérateur borné sur l'espace $\ell^2(V)$ des fonctions de carré sommable sur les sommets du graphe. Ce laplacien est normalisé de telle sorte que son spectre est inclus dans l'intervalle $[0, 2]$. L'utilisation de ce laplacien est motivé par ses liens étroits avec l'opérateur de transition associé à la chaîne de Markov sur le graphe, en particulier pour l'étude des graphes récurrents. D'autre part, les hypothèses considérées dans notre étude font que tous nos résultats s'adaptent au cas du laplacien physique (qui est utilisé dans le chapitre 3). Ici encore, on note $H(\lambda) := -\Delta + \lambda b$ l'opérateur de

Schrödinger sur $\ell^2(V)$ et $s(\lambda)$ et $M(\lambda)$ les bornes de son spectre.

Pour généraliser les résultats du chapitre 3, nous aurons besoin d'hypothèses sur le graphe comme pour les variétés dans le cas continu. Tout d'abord, nous travaillerons sur des graphes connexes, simples et uniformément localement finis, c'est à dire pour lesquels le nombre de voisins de chaque sommet est uniformément borné. D'autre part, nous supposerons que le graphe satisfait les inégalités de Poincaré $(PI(R))$ suivantes pour tout $x \in V$

$$\sum_{y \in B(x,R)} |f(y) - f_{B(x,R)}|^2 \mu_B(y) \leq C(R) \sum_{x,y \in B(x,R), x \sim y} (f(x) - f(y))^2 \mu_{xy}, \qquad (PI(R))$$

qui peuvent être vues comme une minoration uniforme de la première valeur propre non nulle du laplacien sur n'importe quelle boule de rayon R sur le graphe. Il est intéressant de noter que si nous imposons également des hypothèses classiques sur le poids associé au graphe (qui permettent entre autre de considérer le cas des graphes non pondérés : $\mu \equiv 1$), alors les inégalités de Poincaré sont automatiquement vérifiées.

Sous ces conditions, on peut adapter la majorité des résultats prouvés dans le cas particulier des graphes non pondérés $\mathbb{Z}^d$. La principale différence réside dans la considération de potentiels $b = b^+ - b^-$ avec une partie négative non triviale. En effet, comme nous l'avons déjà fait remarquer, il est impossible d'obtenir une partition régulière de l'espace pour des graphes généraux, contrairement au cas des réseaux. Il est toutefois possible de faire un recouvrement par des boules sur ces graphes mais une partie de l'information sur le potentiel est alors perdue. On s'en sort en imposant à la partie négative du potentiel de tendre vers zéro en l'infini, comme dans le cas des variétés.

Il est bien connu que la marche aléatoire sur le graphe non pondéré $\mathbb{Z}^d$ est récurrente si et seulement si $d = 1$ ou $d = 2$. Ainsi, le résultat suivant valable pour des graphes bipartis peut être vu comme une extension du théorème 1.0.3 de [DHKS].

Theorem 1.0.4. *Soit (G, μ) un graphe pondéré biparti et récurrent.*

$$\textit{Si } \sigma(-\Delta + b) \subset [0, 2] \textit{ alors } b \equiv 0.$$

Ce résultat découle d'une caractérisation séquentielle des graphes récurrents : l'existence d'une suite de fonctions qui convergent ponctuellement vers 1 et dont la norme du gradient tend vers 0. Seule l'existence de ces suites est utile pour la démonstration même si dans le cas des réseaux $(\mathbb{Z}^d)_{d=1,2}$, ces suites sont explicites.

La seconde partie de ce chapitre s'intéresse à la quantité $s(\infty) := \lim\limits_{\lambda \to +\infty} s(\lambda)$ pour des potentiels positifs. Ce problème a été traité dans le cas continu par W. Arendt et C. Batty dans [AB2]. Ils montrent, entre autres résultats, que pour des potentiels $V \geq 0$ vérifiant $\lim \inf\limits_{|x| \to \infty} V(x) > 0$, la valeur de $s(\infty)$ correspond au bas du spectre du laplacien de Dirichlet sur le domaine où V s'annule. Ils utilisent pour cela l'existence d'une valeur propre principale de l'opérateur de Schrödinger $H(\lambda)$ pour les grandes valeurs de λ. Ils donnent également une caractérisation de $s(\infty)$ pour des potentiels généraux à l'aide de considérations sur les moyennes du potentiels sur des domaines bien choisis. Leur preuve est en grande partie probabiliste.

Dans le cas des graphes pondérés, nous proposons une approche différente qui permet cependant d'aboutir à des résultats similaires. En effet, l'adaptation des travaux de [AB2] est difficile dans le cadre discret du fait de la considération du bord du domaine pour le laplacien de Dirichlet qui constitue un ensemble de sommets et d'arêtes à part entière dans le cas des graphes. On montre alors une relation du type formule de Green entre le laplacien de Dirichlet sur un domaine et le laplacien classique sur ce même domaine augmenté de son bord. Cette formule est essentielle pour prouver le résultat suivant dans le cas particulier des potentiels $b \geq 0$ vérifiant $\lim \inf_{|x|\to\infty} b(x) > 0$.

Theorem 1.0.5. *Soit $E = \{x \in V, b(x) = 0\}$ et $s(-\Delta_E^D)$ le bas du spectre du laplacien de Dirichlet sur E. Alors, on a*

$$s(\infty) = s(-\Delta_E^D).$$

Ce résultat se généralise ensuite aux potentiels positifs quelconques. De plus, dans le cas particulier des matrices de Jacobi (qui représentent l'opérateur de Schrödinger sur le graphe non pondéré $\mathbb{Z}$), nous obtenons la valeur exacte de $s(\infty)$.

Le chapitre 5 réunit les premiers éléments d'un travail en cours d'élaboration. Après avoir étudié le bas du spectre des opérateurs de Schrödinger $H = -\Delta + b$ dans $\mathbb{Z}^d$ puis sur les graphes dans les chapitres 3 et 4, on cherche ici des conditions sur le potentiel pour obtenir une minoration du bas du spectre essentiel. Nous noterons $s_{ess}(H) := \inf \sigma_{ess}(H)$. De telles caractérisations permettent par exemple d'obtenir des conditions sous lesquelles le spectre de l'opérateur de Schrödinger ne contient que des valeurs propres. Ce travail est largement inspiré de résultats obtenus par G. Metafune et D. Pallara dans le cas euclidien [MP] et par C. Poupaud dans le cas des variétés Riemanniennes [Po].

L'étude du spectre essentiel se distingue de celle du spectre complet dans le sens où seul le comportement du potentiel en l'infini agit sur le spectre essentiel. En effet, le critère de Weyl pour un opérateur auto-adjoint A affirme que

$$\sigma_{ess}(A + K) = \sigma_{ess}(A) \text{ pour tout opérateur } K \text{ compact.}$$

Ainsi, les auteurs dans [MP] et [Po] fournissent une minoration de $s_{ess}(H)$ à l'aide d'une quantité dépendant du comportement du potentiel en l'infini. L'idée de leurs preuves est de recouvrir l'espace avec des boules de rayon fixé puis d'utiliser les inégalités de Sobolev-Poincaré $L^p - L^2$ (p>2) sur ces boules.

Nous donnons la version discrète de ces résultats pour les graphes pondérés et pour les réseaux $\mathbb{Z}^d$.

Chapitre 2

Quelques éléments d'analyse sur les graphes

Cette partie est consacrée à l'analyse sur les graphes pondérés et couvre les prérequis nécessaires à la compréhension de nos travaux. Outre les concepts généraux, nous traitons principalement de la théorie spectrale et de la notion de récurrence sur les graphes. Ainsi, on trouvera ici la démonstration de certains résultats classiques énoncés sans preuve dans le chapitre 4 concernant le spectre des opérateurs de Schrödinger sur les graphes. Le chapitre 3, qui traite du réseau $\mathbb{Z}^d$, peut être lu sans référence au présent chapitre. En effet, la spécificité de $\mathbb{Z}^d$ permet de définir des notations spéciales afin d'exploiter au mieux la régularité de cet espace. Cependant, il pourra être intéressant de faire la comparaison entre ces deux domaines en considérant $\mathbb{Z}^d$ comme un graphe non pondéré particulier. La rédaction de ce chapitre s'inspire de nombreuses références ([BCG], [Ch], [CG], [Del1], [DK], [DK2], [Gr], [GT], [MW], [Te], [Wo]), même si nous fournissons quelques ajouts et notations propres.

1 Généralités sur les graphes

Concept de graphe. Un graphe G est la donnée d'un couple (V, E) où V est l'ensemble (fini ou infini dénombrable) de sommets et E est l'ensemble des arêtes reliant deux sommets. Lorsque deux sommets x et y sont reliés par une arête e, on dit qu'ils sont voisins ou adjacents. On note alors $x \sim y$ et $e = (x, y)$. Une boucle est une arête de type $e = (x, x)$. Le degré d'un sommet x est le nombre de ses voisins et on le note $d(x) := \# \{y \in V, y \sim x\}$. Le graphe G est k-régulier si $d(x) = k$ pour tout $x \in V$. Le graphe est dit simple si il ne contient ni boucles ni arêtes multiples. Enfin, on dit que G est localement fini si chaque sommet a un degré fini et que G est uniformément localement fini (ou à géométrie bornée) si les degrés des sommets sont uniformément bornés. Le graphe G est connexe si deux sommets quelconques x et y peuvent être reliés par un chemin $\{x_k\}_{k=0,\ldots,n}$ avec $x_0 = x$, $x_n = y$ et $x_i \sim x_{i+1}$. On définit alors la distance $d(x, y)$ entre x et y par le nombre d'arêtes du plus petit chemin les reliant. Enfin, pour $x \in V$, $B(x, r) := \{y \in V, d(x, y) \leq r\}$ représente la boule de rayon r. Le graphe $G = (V, E)$ est biparti si il existe deux sous-ensembles $V_0 \subset V$ et $V_1 \subset V$ tels que $V = V_0 \cup V_1$, $V_0 \cap V_1 = \emptyset$ et $(x, y) \in E \Rightarrow (x \in V_0$ et $y \in V_1$ ou $x \in V_1$ et $y \in V_0)$.

Par convention, le graphe est non orienté dans le sens ou $e = (x, y) = (y, x)$. Cependant, on peut choisir une orientation sur les arêtes. On note $\tilde{E}$ l'ensemble des arêtes orientées $e = [x, y]$ ayant pour origine x et pour terminaison y. L'arête $-e = [y, x] \in \tilde{E}$ est l'arête opposée de e. Ainsi, l'ensemble $\tilde{E}$ contient deux fois plus d'arêtes que l'ensemble E. Cette orientation est nécessaire pour définir des fonctions telles que le gradient qui utilise la notion d'origine et de terminaison d'une arête.

A partir de maintenant et sauf mention du contraire, nous considérons des graphes connexes, simples et uniformément localement finis.

Graphes pondérés. Un graphe pondéré (G, μ) est la donnée d'un graphe $G = (V, E)$ et d'un poids $\mu : V \times V \to [0, +\infty)$ positif vérifiant

1. $\mu_{xy} = \mu_{yx}$ pour tout $x, y \in V$,
2. $\mu_{xy} > 0$ si et seulement si $x \sim y$.

Le poids μ peut aussi être vu comme un poids strictement positif sur les arêtes que l'on étend par 0 à $V \times V$. Ainsi, on écrira $\mu(e)$ pour μ_{xy} si $e = (x, y)$. D'autre part, ce poids sur les arêtes engendre un poids sur l'ensemble V des sommets, encore noté μ. Ce poids $\mu : V \to (0, +\infty)$ est défini par

$$\mu(x) = \sum_{y, y \sim x} \mu_{xy}.$$

On distinguera $\mu(e)$ et $\mu(x)$ selon que cette fonction agit sur une arête ou sur un sommet. Enfin, lorsque $\mu(e) = 1$ pour toute arête e, on parle de poids standard ou de poids simple et on a $\mu(x) = d(x)$.

Exemples.

Les réseaux euclidiens Soit $n \geq 1$. Le réseau $\mathbb{Z}^n$ est un graphe n-régulier. L'ensemble V des sommets est constitué des n-uplets $x = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{Z}^n$ et l'ensemble E des arêtes est défini par la relation $e = (x, y) \in E \Leftrightarrow |x - y| = \sum_{i=1,\ldots,n} |x_i - y_i| = 1$.

Graphes de Cayley Soit $(H, \star)$ un groupe d'élément neutre e et S une partie symétrique de H, c'est à dire telle que $e \notin S$ et $x \in S \Rightarrow x^{-1} \in S$. On construit alors le graphe $G = (V, E)$ suivant. L'ensemble des sommets V coïncide avec H et les arêtes sont définies par la relation $e = (x, y) \in E \Leftrightarrow x^{-1} \star y \in S$. Le graphe G est alors appelé graphe de Cayley du groupe H d'ensemble générateur S.

Prenons par exemple pour H le groupe $\mathbb{Z}^d$ et pour S l'ensemble des vecteurs de base $S = \{(\pm 1, 0, \ldots, 0), (0, \pm 1, \ldots, 0), \ldots, (0, 0, \ldots, \pm 1), \}$. Le graphe de Cayley correspond au réseau $\mathbb{Z}^d$ de l'exemple précédent.

2 Théorie du potentiel sur les graphes

2.1 Le laplacien

Motivation. Considérons une fonction réelle deux fois dérivable. Les formules de Taylor permettent d'obtenir une approximation du laplacien $\Delta f(x) = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}$ sur $\mathbb{R}$, appelée schéma des différences finies. Pour h petit, on a

$$\Delta f(x) \approx \frac{2}{h^2}\left(\frac{f(x+h)+f(x-h)}{2} - f(x)\right),$$

et cette relation se généralise aux dimensions supérieures. On remarque qu'il s'agit d'une différence entre la moyenne des valeurs prises par la fonction sur les points voisins et la valeur de la fonction sur le point courant. On va utiliser cette idée de voisins pour étendre la définition aux graphes.

Le laplacien combinatoire. Soit $G = (V, E)$ un graphe connexe localement fini. On va plutôt définir l'opérateur $-\Delta$ qui s'avère être un opérateur positif comme nous le verrons bientôt. Pour toute fonction $f : V \longrightarrow \mathbb{R}$, le laplacien (combinatoire) $-\Delta$ est défini par

$$-\Delta f(x) = f(x) - \frac{1}{d(x)} \sum_{y \sim x} f(y) = \frac{1}{d(x)} \sum_{y \sim x} (f(x) - f(y)).$$

On peut étendre cette définition à un graphe (G, μ) pondéré, connexe et localement fini de la façon suivante

$$-\Delta f(x) = f(x) - \frac{1}{\mu(x)} \sum_{y \sim x} f(y)\mu_{xy} = \frac{1}{\mu(x)} \sum_{y \sim x} (f(x) - f(y))\mu_{xy}.$$

Soit P l'opérateur de transition (ou de Markov) défini par $Pf(x) = \frac{1}{\mu(x)} \sum_{y \sim x} f(y)\mu_{xy}$. On a alors $-\Delta = I - P$. Cet opérateur est essentiel puisqu'il relie le laplacien à la notion de marche aléatoire sur le graphe comme nous le verrons dans la section 4.

Analyse hilbertienne du laplacien. Introduisons à présent les deux espaces de Hilbert suivants associés au graphe G. Le premier est un espace de fonctions sur les sommets V du graphe. On définit

$$\ell^2(V, \mu) := \left\{ f : V \longrightarrow \mathbb{R}, \sum_{x \in V} f(x)^2 \mu(x) < +\infty \right\},$$

muni du produit scalaire $\langle f, g\rangle_V = \sum_{x \in V} f(x)g(x)\mu(x)$, et de la norme $||f||_V = \sqrt{\langle f, f\rangle_V}$.

Le second est un espace de fonctions sur les arêtes orientées $\tilde{E}$. On définit

$$\ell^2(\tilde{E},\mu) := \left\{ \phi : \tilde{E} \longrightarrow \mathbb{R},\ \phi(-e) = -\phi(e) \text{ et } \sum_{e\in E} \phi(e)^2\mu(e) < +\infty \right\},$$

muni du produit scalaire $\langle \phi, \psi \rangle_{\tilde{E}} = \dfrac{1}{2}\displaystyle\sum_{e\in\tilde{E}} \phi(e)\psi(e)\mu(e) = \sum_{e\in E} \phi(e)\psi(e)\mu(e)$, et de la norme $||\phi||_{\tilde{E}} = \sqrt{\langle \phi, \phi \rangle_{\tilde{E}}}$.

On peut alors définir l'opérateur gradient $\nabla : \ell^2(V) \longrightarrow \ell^2(\tilde{E})$ pour toute fonction $f \in \ell^2(V)$ par

$$\nabla f(e) = \nabla f([x,y]) = f(y) - f(x), \text{ pour tout } e = [x,y] \in \tilde{E}.$$

Le co-gradient $\delta : \ell^2(\tilde{E}) \longrightarrow \ell^2(V)$ est défini pour toute fonction $\phi \in \ell^2(\tilde{E})$ par

$$(\delta\phi)(x) = -\frac{1}{\mu(x)} \sum_{e=[x,y]\in\tilde{E}} \phi(e)\mu(e), \text{ pour tout } x \in V.$$

Ainsi, par définition du laplacien, on a pour toute fonction $f \in \ell^2(V)$

$$-\Delta f = \delta\nabla f.$$

La Proposition suivante est essentielle dans l'étude hilbertienne du laplacien.

Proposition 2.2.1. *1. L'opérateur ∇ est borné sur $\ell^2(V)$ et sa norme vérifie l'inégalité $||\nabla|| \leq \sqrt{2}$.*

2. Pour $f, g \in \ell^2(V)$, on a $\langle -\Delta f, g \rangle_V = \langle \nabla f, \nabla g \rangle_{\tilde{E}}$. En particulier, $\delta = \nabla^*$.

3. On a $-\Delta = \nabla^*\nabla = \delta\nabla$ et le laplacien $-\Delta$ est un opérateur auto-adjoint, positif et borné sur $\ell^2(V)$. Sa norme vérifie $||-\Delta|| \leq 2$.

Preuve. 1. On a pour toute fonction f à support fini

$$\begin{aligned}
||\nabla f||^2_{\tilde{E}} &= \frac{1}{2}\sum_{e\in\tilde{E}} (f(y)-f(x))^2\mu_{xy} = \frac{1}{2}\sum_{x\in V}\sum_{y\sim x}(f(y)^2 + f(x)^2 - 2f(x)f(y))\mu_{xy} \\
&\leq \sum_{x\in V}\sum_{y\sim x}(f(y)^2 + f(x)^2)\mu_{xy} = \sum_{y\in V}\sum_{x\sim y} f(y)^2\mu_{xy} + \sum_{x\in V} f(x)^2 \sum_{y\sim x}\mu_{xy} \\
&\leq \sum_{y\in V} f(y)^2\mu(y) + \sum_{x\in V} f(x)^2\mu(x) \leq 2||f||^2_V.
\end{aligned}$$

2. Il suffit de démontrer la relation pour des fonctions à support fini.

$$\begin{aligned}
\langle \nabla f, \nabla g \rangle_{\tilde{E}} &= \frac{1}{2} \sum_{e=[x,y]\in \tilde{E}} \nabla f(e) \nabla g(e) \mu(e) \\
&= \frac{1}{2} \sum_{x\in V} \sum_{y \in V, y\sim x} \left(f(y) - f(x)\right)\left(g(y) - g(x)\right) \mu_{xy} \\
&= \frac{1}{2} \sum_{x\in V} \sum_{y \in V, y\sim x} \left(f(y)g(y) + f(x)g(x) - f(y)g(x) - f(x)g(y)\right) \mu_{xy}.
\end{aligned}$$

Une inversion des signes somme donne

$$\sum_{x\in V} \sum_{y\in V, y\sim x} f(y)g(y)\mu_{xy} = \sum_{y\in V} \sum_{x\in V, x\sim y} f(y)g(y)\mu_{xy} = \sum_{y\in V} f(y)g(y)\mu(y).$$

Ainsi, on obtient

$$\begin{aligned}
\langle \nabla f, \nabla g \rangle_{\tilde{E}} &= \sum_{x\in V} f(x)g(x)\mu(x) - \sum_{x\in V} f(x) \sum_{y\in V, y\sim x} g(y)\mu_{xy} \\
&= \sum_{x\in V} f(x) \left(\sum_{y\in V, y\sim x} \left(g(x) - g(y)\right) \mu_{xy} \right) \\
&= \langle f, -\Delta g \rangle_V
\end{aligned}$$

□

Avant de clore cette section, signalons l'existence dans la littérature d'un autre type de laplacien discret appelé laplacien physique non pondéré. Il est défini pour toute fonction $f : V \longrightarrow \mathbb{R}$ par la relation

$$-\Delta_P f(x) = d(x)f(x) - \sum_{y\sim x} f(y) = \sum_{y\sim x} (f(x) - f(y)),$$

où $d(x)$ est le degré du sommet x. Ce laplacien physique est un opérateur borné si et seulement si le graphe G est uniformément localement fini, c'est à dire si $d(x)$ est uniformément borné. Lorsque le graphe G est k-régulier, ces deux laplaciens sont équivalents.

Comme il est d'usage dans la littérature pour l'étude du graphe non pondéré $\mathbb{Z}^d$, c'est ce laplacien physique qui est considéré dans le chapitre 3. Cependant, le graphe $\mathbb{Z}^d$ étant $2d$-régulier, une simple dilatation permet de se ramener au cas du laplacien combinatoire.

Dans le chapitre 4 au contraire, nous utilisons le laplacien combinatoire plus courant dans l'étude des graphes à cause de son lien avec les marches aléatoires. Cependant, les graphes G considérés sont uniformément localement finis, hypothèse qui permet d'adapter nos preuves au cas du laplacien physique.

2.2 Les laplaciens de Dirichlet et de Neumann

Notion de sous-graphe. Dans cette section, on considère une sous partie connexe S de V, qui peut être infinie. On désigne par $E_S := \{e = (x, y) \in E,\ x, y \in S\} \subset E$ la restriction de E à S. La restriction à S du poids sur les arêtes est toujours notée μ tandis qu'on notera μ_S la restriction de la fonction poids sur les sommets de S. Par abus de notation, nous écrirons parfois S pour désigner le sous-graphe pondéré $G_S := (S, E_S, \mu)$. Pour tout $x \in S$, le degré de x dans S est $d_S(x) := \#\{y \in S, y \sim x\}$ et le poids de x dans S est $\mu_S(x) := \displaystyle\sum_{y \in S, y \sim x} \mu_{xy}$. On remarque que $\mu_S(x) = \mu(x)$ si x a tous ses voisins dans S et que $\mu_S(x) < \mu(x)$ si x a au moins un voisin dans $V - S$.

Pour toute fonction $f : S \longrightarrow \mathbb{R}$, le laplacien $-\Delta_S$ sur le sous-graphe S est défini par

$$-\Delta_S f(x) := f(x) - \frac{1}{\mu_S(x)} \sum_{\substack{y \sim x \\ y \in S}} f(y)\mu_{xy} = \frac{1}{\mu_S(x)} \sum_{\substack{y \sim x \\ y \in S}} (f(x) - f(y))\mu_{xy}. \tag{2.1}$$

Nous pouvons définir les mêmes objets que dans la section précédente en replaçant V, E, $\mu(x)$, Δ, ∇, δ, $\ell^2(\tilde{E})$ et $\ell^2(V)$ respectivement par S, E_S, $\mu_S(x)$, Δ_S, ∇_S, δ_S, $\ell^2(\tilde{E_S})$ et $\ell^2(S)$. On obtient les mêmes résultats que dans la Proposition 2.2.1 et en particulier on a la relation

$$-\Delta_S = \nabla_S^* \nabla_S,$$

qui fournit l'équation suivante pour toutes fonctions f, g dans $\ell^2(S)$

$$\langle f, -\Delta_S g \rangle_S = \langle \nabla_S f, \nabla_S g \rangle_{\tilde{E_S}}. \tag{2.2}$$

Formule de Green. Nous établissons à présent la formule de Green qui est un outil essentiel dans l'analyse des graphes et correspond à la version discrète de l'intégration par partie.

Proposition 2.2.2. *Soit $G = (V, E, \mu)$ un graphe pondéré, connexe et localement fini. Soit S un sous-ensemble de V, fini ou infini. Pour toute fonction $f, g \in \ell^2(V)$, on a*

$$\sum_{x \in S} f(x)(-\Delta g)(x)\mu(x) = \frac{1}{2} \sum_{e \in \tilde{E_S}} \nabla f(e) \nabla g(e) \mu(e) - \sum_{x \in S} \sum_{\substack{y \in V - S \\ y \sim x}} f(x) \nabla g([x, y]) \mu_{xy}. \tag{2.3}$$

Preuve. On a $\frac{1}{2} \sum_{e \in \tilde{E_S}} \nabla f(e) \nabla g(e) \mu(e) = \langle \nabla f, \nabla g \rangle_{\tilde{E_S}} = \langle \nabla_S f, \nabla_S g \rangle_{\tilde{E_S}}$. En utilisant la relation (2.2), on obtient

$$
\begin{aligned}
\langle \nabla_S f, \nabla_S g\rangle_{\tilde{E_S}} &= \langle f, -\Delta_S g\rangle_S \\
&= \sum_{x\in S} f(x) \sum_{y\in S, y\sim x} (g(x)-g(y))\mu_{xy} \\
&= \sum_{x\in S} f(x) \sum_{y\in V, y\sim x} (g(x)-g(y))\mu_{xy} - \sum_{x\in S} f(x) \sum_{y\in V-S, y\sim x} (g(x)-g(y))\mu_{xy} \\
&= \sum_{x\in S} f(x)(-\Delta g)(x)\mu(x) + \sum_{x\in S} \sum_{\substack{y\in V-S\\ y\sim x}} f(x)\nabla g([x,y])\mu_{xy}.
\end{aligned}
$$

□

Afin de définir les laplaciens de Dirichlet et de Neumann, nous introduisons les sous-ensembles suivants associés à S.
Le bord de S : $\partial S := \{x \notin S,\, \exists y \in S,\, y \sim x\}$.
Le bord de E_S : $\delta E_S := \{e = (x,y) \in E,\, x \in S,\, y \notin S\}$.
L'intérieur de S : $\overset{\circ}{S} := \{x \in S,\, y \sim x \Rightarrow y \in S\}$, qui peut être vide.
L'ensemble $S^* := S \cup \partial S$.

Le laplacien de Dirichlet. Soit S un sous-ensemble de V. On rappelle que l'ensemble S^* est défini par $S^* = S \cup \partial S$. Une fonction $f : S^* \longrightarrow \mathbb{R}$ satisfait les conditions aux bords de Dirichlet (DBC) si

$$
f(x) = 0 \text{ pour tout } x \in \partial S. \qquad (DBC)
$$

Pour $f : S^* \longrightarrow \mathbb{R}$ vérifiant (DBC), on définit $\tilde{f} : V \longrightarrow \mathbb{R}$ le prolongement de f à V tout entier en posant $\tilde{f}(x) = 0$ si $x \notin S^*$. Le laplacien de Dirichlet $-\Delta_S^D$ est alors défini par

$$
-\Delta_S^D f(x) = \begin{cases} -\Delta \tilde{f}(x) & \text{si } x \in S \\ 0 & \text{si } x \in \partial S. \end{cases} \qquad (2.4)
$$

Formule de Green pour le laplacien de Dirichlet. Si $f, g \in \ell^2(S^*)$ satisfont les conditions aux bords de Dirichlet (DBC), la formule de Green (2.3) appliquée à S^* donne

$$
\begin{aligned}
\sum_{x\in S^*} f(x)(-\Delta_S^D g)(x)\mu(x) &= \sum_{x\in S^*} \tilde{f}(x)(-\Delta\tilde{g})(x)\mu(x) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{e\in \tilde{E_{S^*}}} \nabla\tilde{f}(e)\nabla\tilde{g}(e)\mu(e) - \sum_{x\in S^*}\sum_{\substack{y\in V-S^*\\ y\sim x}} \tilde{f}(x)\nabla\tilde{g}([x,y])\mu_{xy} \\
&= \frac{1}{2}\sum_{e\in \tilde{E_{S^*}}} \nabla\tilde{f}(e)\nabla\tilde{g}(e)\mu(e)
\end{aligned}
$$

car la dernière somme se réduit aux sommets $x \in \partial S$ pour lesquels $f(x) = 0$. D'autre part, on a $\sum_{x \in S^*} f(x)(-\Delta_S^D g)(x)\mu(x) = \left\langle f, -\Delta_S^D g \right\rangle_{S^*}$ en remarquant que $\mu_{S^*}(x) = \mu(x)$, pour $x \in S$ et que $f(x) = 0$, pour $x \in \partial S$. Ainsi, on obtient la formule de Green pour le laplacien de Dirichlet

$$\left\langle f, -\Delta_S^D g \right\rangle_{S^*} = \frac{1}{2} \sum_{e \in \tilde{E_{S^*}}} \nabla f(e) \nabla g(e) \mu(e). \tag{2.5}$$

Le laplacien de Neumann. Une fonction $f : S^* \longrightarrow \mathbb{R}$ satisfait les conditions aux bords de Neumann (NBC) si

$$\sum_{y \in \partial S, y \sim x} (f(y) - f(x))\mu_{xy} = 0 \text{ pour tout } x \in S - \overset{\circ}{S}. \qquad (NBC)$$

Pour une telle fonction f, on note toujours $\tilde{f} : V \longrightarrow \mathbb{R}$ le prolongement de f à V tout entier en posant $\tilde{f}(x) = 0$ si $x \notin S^*$. Le laplacien de Neumann $-\Delta_S^N$ est défini par

$$-\Delta_S^N f(x) = \begin{cases} -\Delta \tilde{f}(x) & \text{si } x \in S \\ 0 & \text{si } x \in \partial S. \end{cases} \tag{2.6}$$

2.3 Représentation matricielle du laplacien

On peut associer plusieurs matrices à un graphe $G = (V, E, \mu)$ pondéré, connexe et localement fini (voir [MW]). Ces matrices sont indexées sur l'ensemble V des sommets.

1. La matrice d'adjacence $A = [a_{x,y}]_{x,y \in V}$ où $a_{x,y} = \mu_{xy}$.
2. La matrice de transition $P = [p_{x,y}]_{x,y \in V}$ où $p_{x,y} = \frac{\mu_{xy}}{\mu(x)}$.
3. La matrice diagonale de poids $D = [d_{x,y}]_{x,y \in V}$ où $d_{x,x} = \mu(x)$ et $d_{x,y} := 0$ si $x \neq y$.

Lorsque le graphe est muni du poids standard ($\mu \equiv 1$), $a_{x,y}$ vaut 1 si $x \sim y$ et 0 sinon et $d_{x,x} = d(x)$ correspond au nombre de voisins de x.

La matrice représentant le laplacien physique est

$$-\Delta_P = D - A,$$

et la matrice représentant le laplacien combinatoire est

$$-\Delta = I - P.$$

Cependant, certains auteurs ([Ch]) définissent le laplacien combinatoire par la formule

$$-\tilde{\Delta} = D^{-1/2} \left(-\Delta_P\right) D^{1/2} = I - D^{-1/2} A D^{1/2}.$$

Un exemple : les matrices de Jacobi. Dans cette section, nous traitons l'exemple du graphe non pondéré $\mathbb{Z}$. Ce cas particulier est important car il rejoint la théorie des matrices de Jacobi (voir [Te] et [KS] principalement) mais également l'utilisation de méthodes numériques (voir par exemple [IK] ou [St]).

Le graphe $\mathbb{Z}$ étant 1-régulier, nous pouvons utiliser le laplacien physique pour éviter d'écrire les fractions. D'autre part, on peut identifier l'ensemble des fonctions définies sur le graphe comme l'ensemble des suites réelles sur $\mathbb{Z}$. Pour $u \in \ell^2(\mathbb{Z})$, on a donc pour $n \in \mathbb{Z}$:

$$-\Delta u(n) = 2u(n) - u(n+1) - u(n-1).$$

On peut représenter ce laplacien sous la forme d'une matrice de Jacobi infinie sur $\ell^2(\mathbb{Z})$:

$$-\Delta = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & & \\ \ddots & 2 & -1 & & 0 & \\ & -1 & 2 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & -1 & \\ & 0 & & -1 & 2 & \ddots \\ & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \tag{2.7}$$

Si l'on perturbe cet opérateur par une matrice diagonale infinie, on obtient une nouvelle matrice de Jacobi représentant l'opérateur de Schrödinger sur $\ell^2(\mathbb{Z})$. Ainsi, l'étude des opérateurs de Schrödinger discrets sur $\mathbb{Z}^d$ a débuté par celle du cas particulier des matrices de Jacobi. On a ensuite cherché à généraliser les résultats obtenus dans ce domaine.

Considérons à présent un intervalle fini $I_p \subset \mathbb{Z}$ de longueur p que l'on identifiera à l'intervalle $I = [1, \ldots, p]$ pour simplifier. Le laplacien de Dirichlet $-\Delta_I^D$ agit sur des vecteurs u de taille $p+2$ de la forme $u = (u_0 = 0, u_1, \ldots, u_p, u_{p+1} = 0)$. Il peut être représenté par la matrice A de taille $p+2$ suivante, conformément à la définition (2.4)

$$A = \begin{pmatrix} 0 & \ldots & & & \ldots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & -1 & 0 \\ & 0 & & -1 & 2 & -1 \\ 0 & & & & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Cependant, en considérant les conditions de Dirichlet (DBC) $u_0 = 0$ et $u_{p+1} = 0$, on vérifie facilement que la matrice de taille p suivante est une représentation équivalente du laplacien de Dirichlet $-\Delta_p^D$ qui concorde avec la définition (2.4)

$$-\Delta_p^D = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & & \\ -1 & 2 & \ddots & & \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & \ddots & 2 & -1 \\ & & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}, \tag{2.8}$$

Le laplacien de Neumann $-\Delta_I^N$ sur I agit sur des vecteurs $u = (u_0, u_1, \ldots, u_p, u_{p+1})$ de taille $p+2$ vérifiant $u_0 = u_1$ et $u_p = u_{p+1}$ (condition de Neumann (NBC). Il admet la représentation matricielle A ci-dessus mais en considérant les conditions de Neumann, on obtient la matrice $-\Delta_p^N$ de taille p suivante, qui concorde avec la définition (2.6)

$$-\Delta_p^N = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & & \\ -1 & 2 & \ddots & & \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & \ddots & 2 & -1 \\ & & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.9}$$

Ainsi, les conditions de Dirichlet et de Neumann sont intégrées dans les coins des matrices.

3 Théorie spectrale

Nous étudions dans cette partie le spectre du laplacien sur un graphe. Plus particulièrement, nous nous intéressons à la caractérisation du bas du spectre ainsi qu'à la notion de trou spectral. Ces éléments spectraux sont intimement liés à la géométrie du graphe qui permet alors d'estimer ces quantités. Nous débutons par le cas des graphes finis.

3.1 Spectre des graphes finis

Soit $G = (V, E, \mu)$ un graphe pondéré, connexe et fini. On note $N := \#V$ le nombre de sommets de G. L'ensemble des fonctions réelles définies sur V est alors un espace vectoriel de dimension finie N que l'on identifie à $\mathbb{R}^N$ muni du produit scalaire $\langle ., . \rangle$. La représentation matricielle du laplacien est une matrice de taille $N \times N$. Comme nous l'avons vu à le section précédente, le laplacien combinatoire $-\Delta$ est un opérateur auto-adjoint, positif de norme satisfaisant $||-\Delta|| \leq 2$. Son spectre est donc composé de N valeurs propres réelles $\{\lambda_i\}_{i=0,\ldots,N-1}$ rangées par ordre croissant et contenues dans l'intervalle $[0,2]$: $\sigma(-\Delta) = \{\lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \cdots \leq \lambda_{N-1}\} \subset [0,2]$. Pour $i = 0, \ldots, N-1$, on note v_i un vecteur propre associé à la valeur propre λ_i de telle manière que la famille $\{v_i\}_{i=0,\ldots,N-1}$ soit orthonormée. On rappelle la caractérisation variationnelle des valeurs propres d'un opérateur auto-adjoint.

Proposition 2.3.1. *Soit A un opérateur auto-ajoint et $\{\lambda_i\}_{i=0,\ldots,N-1}$ l'ensemble de ses valeurs propres rangées par ordre croissant et $\{v_i\}_{i=0,\ldots,N-1}$ une famille orthonormée de vecteurs propres associés. Par le principe du Min-Max, on a, pour $i = 0, \ldots, N-1$*

$$\lambda_i = \inf_{v \perp span(v_0,\ldots,v_{i-1})} \frac{\langle Av, v\rangle}{\langle v, v\rangle}. \tag{2.10}$$

Le rapport $\frac{\langle Av,v\rangle}{\langle v,v\rangle}$ est appelé quotient de Rayleigh de A.

Nous allons nous intéresser plus particulièrement au bas du spectre λ_0 et au trou spectral qui correspond à la quantité $\lambda_1 - \lambda_0$.

Concernant le bas du spectre, la situation est assez simple pour les graphes finis. En effet, on vérifie aisément que le vecteur constant égal à 1 noté $\mathbb{1}$ est un vecteur propre associé à la valeur propre 0. D'autre part, si f est un vecteur propre associé à la valeur propre 0, la relation $\langle -\Delta f, f\rangle = \frac{1}{2} \sum\limits_{x,y \in V, x\sim y} (f(x) - f(y))^2 = 0$ et la connexité du graphe montrent que f est constant. Ainsi, on a montré que

$$\lambda_0 = 0 \text{ est une valeur propre simple de vecteur propre associé } \mathbb{1}.$$

Ainsi, le trou spectral $\lambda_1 - \lambda_0$ est égal à λ_1. D'autre part, en utilisant la Proposition 2.3.1, on en déduit une caractérisation de λ_1.

$$\lambda_1 = \inf_{v \perp \mathbb{1}} \frac{\langle Av, v\rangle}{\langle v, v\rangle}.$$

Nous allons maintenant faire le lien entre certaines propriétés géométriques du graphe et le trou spectral λ_1. Pour cela nous introduisons la constante de Cheeger pour un graphe pondéré.

Rappelons que pour un sous-ensemble S de V, E_S désigne l'ensemble des arêtes de S et le bord de E_S est défini par $\delta E_S := \{e = (x, y) \in E,\, x \in S,\, y \notin S\}$. De plus, le poids de S est définie par $\mu(S) := \sum\limits_{x\in S} \mu(x)$ et le poids de E_S est définie par $\mu(E_S) := \sum\limits_{e \in E_S} \mu(e)$.

Definition 2.3.2. *Soit $G = (V, E, \mu)$ un graphe fini pondéré. La constante de Cheeger de G, notée h est définie par*

$$h := \inf_{\substack{S \subset V \\ \mu(S) \leq \frac{1}{2}\mu(V)}} \frac{\mu(\delta E_S)}{\mu(S)}.$$

Inégalité de Cheeger. Le théorème suivant donne un encadrement de λ_1 à l'aide de la constante de Cheeger (voir [Gr] pour la démonstration). Il faut cependant relativiser la portée de ce résultat car la constante de Cheeger est souvent difficile à calculer.

Theorem 2.3.3. *Soit $G = (V, E, \mu)$ un graphe fini pondéré et h sa constante de Cheeger. On a*

$$\frac{h^2}{2} \leq \lambda_1 \leq 2h.$$

La seconde inégalité est facile à obtenir en utilisant les définitions du quotient de Rayleigh et de la constante de Cheeger. La première inégalité est plus ardue à prouver (cf [Gr] Theorem 3.2). Cependant, dans le cas des graphes non pondérés, on peut trouver une preuve relativement simple dans [Ch] Theorem 2.2.

Inégalité de Cheeger pour le laplacien de Dirichlet Soit $S \subset V$ un sous-ensemble fini et $-\Delta_S^D$ le laplacien de Dirichlet sur S. Rappelons la formulation variationnelle pour la plus petite valeur propre $\lambda_{0,S}^D$ du laplacien de Dirichlet

$$\lambda_{0,S}^D = \inf_{\substack{f \neq 0 \\ f \sim (DBC)}} \frac{\left\langle -\Delta_S^D f, f \right\rangle_{S^*}}{||f||_{S^*}^2}.$$

En utilisant la formule de Green pour le laplacien de Dirichlet (2.5), on obtient

$$\lambda_{0,S}^D = \inf_{\substack{f \neq 0 \\ f \sim (DBC)}} \frac{\frac{1}{2} \sum_{e \in \tilde{E_{S^*}}} (\nabla f(e))^2 \mu(e)}{||f||_{S^*}^2}.$$

On déduit facilement de cette formule que $\lambda_{0,S}^D > 0$.

Le théorème suivant donne l'inégalité de Cheeger pour le laplacien de Dirichlet (voir [Gr] pour la démonstration).

Theorem 2.3.4. *Soit $S \subset V$ un sous ensemble fini et h_S sa constante de Cheeger. On a*

$$\lambda_{0,S}^D \geq \frac{h^2}{2}.$$

Ce résultat sera utile pour établir l'inégalité de Cheeger pour les graphes infinis.

Trou spectral et diamètre du graphe. Le résultat que nous présentons dans cette partie est essentiel pour la suite de nos travaux. Il donne une minoration de la première valeur propre non nulle λ_1 à l'aide du diamètre D du graphe, c'est à dire la plus grande distance entre deux sommets du graphe. Ce théorème est énoncé sans preuve dans le chapitre 4 mais vu son importance dans nos travaux, nous donnons ici une démonstration. Ce résultat est dû à [Ch] dans le cas des graphes non pondérés.

Theorem 2.3.5. *Soit $G = (V, E, \mu)$ un graphe fini, pondéré et connexe, de diamètre $D := \max_{x,y \in V} d(x, y)$. Soit $\mu_0 := \min_{e \in E} \mu(e)$. On a*

$$\lambda_1 \geq \frac{\mu_0}{\mu(V)D}.$$

Preuve. Soit f un vecteur propre associé à la valeur propre λ_1. D'après la caractérisation variationnelle, f est orthogonal au vecteur $\mathbb{1}$, ce qui se traduit par la relation $\sum_{x \in V} f(x)\mu(x) = 0$. Ainsi, f prend des valeurs positives et négatives. Normalisons f de telle manière que $\max |f| = \max(f) = 1$. Soit x et y vérifiant $f(x) = 1$ et $f(y) < 0$. Par connexité de G, il existe un chemin $\{x_k\}_{k=0,\dots,n}$ avec $x_0 = x$, $x_n = y$ et $n \leq D$ par définition du diamètre. On a, puisque f est un vecteur propre associé à λ_1

$$\lambda_1 = \frac{1}{2} \frac{\sum_{x,y \in V, x \sim y} (f(x) - f(y))^2 \mu_{xy}}{\sum_{x \in V} f(x)^2 \mu(x)}$$

Mais $f(x) \leq 1$ pour tout $x \in V$ et donc

$$\sum_{x \in V} f(x)^2 \mu(x) \leq \mu(V)$$

D'autre part, on a

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2} \sum_{x,y \in V, x \sim y} (f(x) - f(y))^2 \mu_{xy} &\geq \mu_0 \sum_{k=0}^{n-1} (f(x_k) - f(x_{k+1}))^2 \\
&\geq \frac{\mu_0}{n} (\sum_{k=0}^{n-1} f(x_k) - f(x_{k+1}))^2 \\
&\geq \frac{\mu_0}{n} (f(x_0) - f(x_n))^2 \geq \frac{\mu_0}{n},
\end{aligned}$$

car $f(x_0) = 1$ et $f(x_n) < 0$. Maintenant, on utilise le fait que $n \leq D$ et on obtient la relation voulue

$$\lambda_1 \geq \frac{\mu_0}{\mu(V)D}.$$

□

3.2 Spectre des graphes infinis

Soit $G = (V, E, \mu)$ un graphe pondéré infini et connexe. Comme nous l'avons vu à le section précédente, le laplacien combinatoire $-\Delta$ est un opérateur borné sur $\ell^2(V)$, auto-adjoint, positif et de norme satisfaisant $|| - \Delta|| \leq 2$. Son spectre est donc réel et est contenu dans l'intervalle $[0, 2]$: $\sigma(-\Delta) \subset [0, 2]$. Contrairement au cas fini, le bas du spectre d'un graphe infini n'est pas toujours égal à 0. On notera le bas du spectre $s(-\Delta) := \inf \sigma(-\Delta)$. Par exemple, si G est un arbre non pondéré de valence $q \geq 2$, c'est à dire un graphe q-régulier sans circuits (chemins fermés), on a $\sigma(-\Delta) = \left[1 - \frac{2\sqrt{q-1}}{q}, 1 + \frac{2\sqrt{q-1}}{q}\right]$. Ainsi, pour $q \geq 3$, on a $s(-\Delta) = 1 - \frac{2\sqrt{q-1}}{q} > 0$. Cependant pour $q = 2$ (G est alors le graphe $\mathbb{Z}$) et plus généralement pour $G = \mathbb{Z}^n$, on a $\sigma(-\Delta) = [0, 2]$ et donc $s(-\Delta) = 0$.

Le but de cette partie est de donner quelques résultats sur le bas du spectre $s(-\Delta)$ d'un graphe infini.

Caractérisation variationnelle. Tout d'abord, le laplacien étant un opérateur borné et auto-adjoint, le principe du Min-Max donne une caractérisation variationnelle du bas du spectre $s(-\Delta)$.

$$s(-\Delta) = \inf_{\substack{f \in \ell^2(V) \\ f \neq 0}} \frac{\langle -\Delta f, f \rangle_V}{\langle f, f \rangle_V} = \inf_{\substack{f \in \ell^2(V) \\ f \neq 0}} \frac{\langle \nabla f, \nabla f \rangle_{\tilde{E}}}{\langle f, f \rangle_V} = \inf_{\substack{f \in \ell^2(V) \\ f \neq 0}} \frac{||\nabla f||^2_{\tilde{E}}}{||f||^2_V}. \tag{2.11}$$

Approximation du bas du spectre. Le résultat suivant montre qu'on peut approximer le bas du spectre $s(-\Delta)$ d'un graphe infini par le bas du spectre du laplacien de Dirichlet sur des sous-graphes bien choisis. Il est prouvé dans [D].

Theorem 2.3.6. *Soit $G = (V, E, \mu)$ un graphe pondéré infini et connexe et $\{S_n)\}_{n \geq 1}$ une suite de graphes finis dont l'union est égale à G. On considère le laplacien de Dirichlet $-\Delta^D_{S_n}$ sur S_n et on note $\lambda^D_{0,n}$ sa plus petite valeur propre. On a alors*

$$s(-\Delta) = \lim_{n \to +\infty} \lambda^D_{0,n}.$$

Ce résultat sera utile pour établir l'inégalité de Cheeger pour les graphes infinis.

Inégalité de Cheeger et croissance du graphe. Enfin, $s(-\Delta)$ est également lié à la géométrie du graphe. Nous aurons besoin de quelques définitions. Comme dans le cas fini, on peut définir la constante de Cheeger h d'un graphe infini.

$$h := \inf_{\substack{S \subset V \\ S fini}} \frac{\mu(\delta E_S)}{\mu(S)}.$$

Définissons à présent la croissance d'un graphe infini. Pour x_0 fixé dans V, on considère la boule $B(x_0, r) := \{y \in V, d(x_0, y) \leq r\}$ et on note $\mu(B(r))$ sa mesure. La croissance de G est donnée par les deux constantes suivantes, indépendantes du choix du point x_0.

$$\gamma = \liminf_{r \to +\infty} \mu(B(r))^{1/r} \text{ et } \rho = \limsup_{r \to +\infty} \mu(B(r))^{1/r}.$$

Si $\gamma > 1$, on dit que le graphe G est à croissance exponentielle et si $\rho < +\infty$, G est à croissance au plus exponentielle. Si $\gamma = 1$, on dit que le graphe G est à croissance sous-exponentielle. On a alors

Theorem 2.3.7. *Soit $G = (V, E, \mu)$ un graphe pondéré infini et connexe. Soit h sa constante de Cheeger et soit $\gamma = \liminf_{r\to+\infty} \mu(B(r))^{1/r}$. On a*

$$0 \leq \frac{h^2}{2} \leq s(-\Delta) \leq h \leq 1 - \frac{1}{\gamma} < 1.$$

En particulier, on obtient que $s(-\Delta) = 0$ si et seulement si $h = 0$. D'autre part, si G est à croissance sous-exponentielle, alors $\gamma = 1$ et $s(-\Delta) = h = 0$. C'est le cas par exemple des graphes $\mathbb{Z}^n$ qui sont à croissance polynomiale. Un autre exemple de graphes pour lesquels $s(-\Delta) = h = 0$ sont les graphes de Cayley de groupes moyennables.

Preuve. Soit S un sous-ensemble fini de V et $\mathbb{1}_S$ sa fonction indicatrice. D'après la caractérisation (2.11), on a

$$s(-\Delta) \leq \frac{\langle \nabla \mathbb{1}_S, \nabla \mathbb{1}_S \rangle_{\tilde{E}}}{\langle \mathbb{1}_S, \mathbb{1}_S \rangle_V} = \frac{\mu(\delta E_S)}{\mu(S)},$$

ce qui prouve que $s(-\Delta) \leq h$.

D'autre part, soit $B(r)$ la boule de rayon r centrée sur un point x_0 fixé. On a

$$\mu(B(r+1)) - \mu(B(r)) = \sum_{x \in \partial B(r)} \mu(x) \geq \mu(\delta B(r+1)) \geq h\mu(B(r+1)).$$

Par induction, on a donc $\mu(B(r+1)) \geq \frac{\mu(B(1))}{(1-h)^r}$ et donc $\gamma \geq \frac{1}{1-h}$ soit $h \leq 1 - \frac{1}{\gamma}$.

L'inégalité $\frac{h^2}{2} \leq s(-\Delta)$ est plus délicate à prouver. Dans le cas des graphes non pondérés cependant, la démonstration donnée dans [DK2] est relativement simple. Dans le cas des graphes pondérés, on considère une suite de graphes finis $\{S_n)\}_{n\geq 1}$ dont l'union est égale à G. On considère ensuite le laplacien de Dirichlet $-\Delta^D_{S_n}$ sur S_n et on note $\lambda^D_{0,n}$ sa plus petite valeur propre. Si on note h_n la constante de Cheeger associée à S_n, le Théorème 2.3.4 montre que

$$\lambda^D_{0,n} \geq \frac{1}{2} h_n^2.$$

Mais par définition de h, il est clair que $h \leq h_n$ et ainsi, on a pour tout $n \geq 1$

$$\lambda^D_{0,n} \geq \frac{1}{2} h^2.$$

Maintenant, on utilise le Théorème 2.3.6 qui affirme que $\lambda_0 = \lim_{n\to+\infty} \lambda^D_{0,n}$, et le résultat suit en passant à la limite. □

3.3 Exemples

Nous revenons ici sur les matrices de Jacobi qui sont un cas particulier important (correspondant à la dimension $d = 1$) des opérateurs de Schrödinger sur $\mathbb{Z}^d$ étudiés dans le chapitre 3. Les résultats de théorie spectrale donnés dans la section précédente pour des graphes généraux sont souvent plus précis dans le cadre des matrices de Jacobi.

Ainsi, une transformation de Fourier montre que le spectre de la matrice de Jacobi infinie (2.7) est absolument continu et $\sigma(-\Delta) = \sigma_{ess}(-\Delta) = [0, 4]$. En particulier, on a $s(-\Delta) = 0$. On peut retrouver ce résultat en remarquant que le graphe $\mathbb{Z}$ est à croissance polynomiale, ce qui implique que $\gamma = 1$ et $h = s(-\Delta) = 0$ d'après le théorème 2.3.7.

Pour une partie finie $I \subset \mathbb{Z}$ de taille p, le laplacien correspondant à la définition 2.1 est représenté par la matrice suivante

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 0 & & \\ -1 & 2 & \ddots & & \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & \ddots & 2 & -1 \\ & & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Nous avons vu plus haut que cette matrice correspond à la matrice 2.9 et représente le laplacien de Neumann sur I. De plus, le spectre de cette matrice est explicite et vaut $\sigma(-\Delta_p^N) = \left\{\lambda_k = 2 - 2\cos(\frac{k\pi}{p}) = 4\sin^2(\frac{k\pi}{2p})\right\}_{k=0\ldots p-1}$. En particulier, $\lambda_0 = 0$ comme attendu et le trou spectral est égal à $\lambda_1 = 4\sin^2(\frac{\pi}{2p})$.

Pour le laplacien de Dirichlet sur I représenté par la matrice 2.8, le spectre est le suivant $\sigma(-\Delta_I^D) = \left\{\mu_k = 2 - 2\cos(\frac{k\pi}{p+1}) = 4\sin^2(\frac{k\pi}{2(p+1)})\right\}_{k=1\ldots p}$ (voir [IK], [St]).

4 Graphes récurrents

Cette section établit les rapports qui existent entre les probabilités, la théorie des graphes et la théorie du potentiel. Comme nous allons le voir, ces domaines sont intimement liés et permettent d'appréhender un même problème de différentes manières. Nous nous concentrerons sur la notion de récurrence d'une chaîne de Markov ou d'un graphe et sur sa caractérisation en théorie du potentiel.

4.1 Chaînes de Markov

Définitions. Une chaîne de Markov est un couple (X, P) où X est un ensemble fini ou dénombrable et $P = [p(x, y)]_{x,y\in X}$ est une matrice stochastique (pour tout $x \in X$, on a $\sum_{y\in X} p(x, y) = 1$) appelée matrice (ou opérateur) de transition. La quantité $0 \leq p(x, y) \leq 1$ représente la probabilité de passer du point x au point y en une itération. On peut associer à la chaîne de Markov une suite de variables aléatoires $(Z_n)_{n\geq 0}$ sur X donnant la position aléatoire à chaque itération, Z_0 étant la position initiale. On définit la quantité $p^{(n)}(x,y) = \mathbb{P}(Z_n = y|Z_0 = x) = \mathbb{P}_x(Z_n = y)$ qui représente la probabilité de passer de x à y en n itérations. On dit que la chaîne est irréductible si pour tout $x, y \in X$, il existe $n \in \mathbb{N}$ tel que $p^{(n)}(x,y) > 0$.

La fonction de Green de la chaîne (X,P) est définie pour tout $x, y \in X$, et pour tout $z \in \mathbb{C}$ par

$$G(x,y|z) = \sum_{n\geq 0} p^{(n)}(x,y)z^n.$$

On notera $G(x,y) := G(x,y|1)$ l'espérance du nombre de visites de $(Z_n)_{n\geq 0}$ en y sachant que $Z_0 = x$.

La fonction de retour de la chaîne (X,P) est définie pour tout $x, y \in X$, et pour tout $z \in \mathbb{C}$ par

$$U(x,x|z) = \sum_{n\geq 0} \mathbb{P}_x(t^x = n)z^n$$

où $\mathbb{P}_x(t^x = n) = \mathbb{P}(t^x = n|Z_0 = x)$ et $t^x = \min\{n \geq 1, Z_n = x\}$. On notera $U(x,x) := U(x,x|1) = \mathbb{P}_x(t^x < +\infty)$ la probabilité de retour en x sachant qu'on part de x.

Récurrence d'une chaîne de Markov. Nous définissons à présent la notion de récurrence d'une chaîne de Markov.

Definition 2.4.1. *La chaîne de Markov (X,P) est dite récurrente si $G(x,y) = +\infty$ pour tout $x, y \in X$ ou de manière équivalente si $U(x,x) = 1$ pour tout $x \in X$.*

Dans le cas contraire, on dit que la chaîne de Markov est transiente.

Les marches aléatoires sur $\mathbb{Z}^n$ sont des exemples classiques de chaînes de Markov. Elles sont récurrentes pour $n = 1$ ou $n = 2$ et transientes pour $n \geq 3$.

4.2 Graphes, chaînes de Markov et théorie du potentiel.

Chaîne de Markov associée à un graphe pondéré. Soit $(G,\mu) = (V,E,\mu)$ un graphe pondéré infini et connexe. On associe à G la chaîne de Markov (X,P) où $X = V$ et $P = [p(x,y)]_{x,y\in V}$ avec $p(x,y) = \frac{\mu_{xy}}{\mu(x)}$. La connexité du graphe est équivalente à l'irréductibilité de la chaîne de Markov. On dira que le graphe pondéré (G,μ), ou plus simplement que le graphe G est récurrent (respectivement transient) si la chaîne de Markov associée est récurrente (respectivement transiente). On rappelle que le laplacien combinatoire $-\Delta$ sur G vérifie la relation $-\Delta = I - P$.

On considère l'espace de Dirichlet $\mathcal{D}(V)$ des fonctions f sur V (pas nécessairement dans $\ell^2(V,\mu)$) telles que $\nabla f \in \ell^2(\tilde{E},\mu)$. Pour $f \in \mathcal{D}(V)$, on définit la somme de Dirichlet par

$$D(f) := \langle \nabla f, \nabla f \rangle_{\tilde{E}} = \frac{1}{2} \sum_{x,y\in V} \left(f(y) - f(x)\right)^2 \mu_{xy}. \tag{2.12}$$

C'est une semi-norme de noyau composé des fonctions constantes. On peut cependant équiper $\mathcal{D}(V)$ d'un produit scalaire en fixant une origine $o \in V$ sur le graphe. On le note $\langle .,. \rangle_{\mathcal{D},o}$ et il est défini pour tout $f, g \in \mathcal{D}(V)$ par

$$\langle f, g \rangle_{\mathcal{D},o} = \langle \nabla f, \nabla g \rangle_{\tilde{E}} + f(o)g(o).$$

L'espace de Dirichlet $(\mathcal{D}(V), \langle .,. \rangle_{\mathcal{D},o})$ est alors un espace de Hilbert et la convergence dans $\mathcal{D}(V)$ entraine la convergence ponctuelle. D'autre part, pour toute fonction $f \in \mathcal{D}(V)$, on a $\nabla^* \nabla f = -\Delta f$.

Soit $\ell_0(V)$ l'ensemble des fonctions à support fini sur V et $\mathcal{D}_0(V)$ sa fermeture dans $\mathcal{D}(V)$. On peut maintenant énoncer le principal résultat de cette partie.

Theorem 2.4.2. *Le graphe pondéré (G, μ) est récurrent si et seulement si la fonction constante $\mathbb{1}$ appartient à $\mathcal{D}_0(V)$.*

La preuve de ce résultat que l'on pourra trouver dans [Wo] utilise la notion de flux sur les graphes que nous ne développons pas ici. Le Théorème 2.4.2 peut se réécrire de la manière suivante.

Proposition 2.4.3. *Le graphe pondéré (G, μ) est récurrent si et seulement si il existe une suite de fonctions à supports finis $(\phi_p)_{p \geq 0}$ telle que*

1. $\phi_p(x) \underset{p \to +\infty}{\longrightarrow} 1$ *pour tout* $x \in V$ *et*
2. $\langle \nabla \phi_p, \nabla \phi_p \rangle_{\tilde{E}} \underset{p \to +\infty}{\longrightarrow} 0.$

Le premier point vient du fait que la convergence dans $\mathcal{D}(V)$ entraine la convergence ponctuelle et le second point du fait que $\nabla \mathbb{1} = 0$.

Exemples Dans le cas général, la suite de fonctions traduisant le Théorème 2.4.2 n'est pas explicite. Cependant, dans le cas particulier des graphes $\mathbb{Z}$ et $\mathbb{Z}^2$ (munis du poids standard $\mu \equiv 1$) qui sont récurrents, les suites suivantes vérifient les conditions énoncées dans la proposition 2.4.3.

Pour le graphe $\mathbb{Z}$, on peut identifier les fonctions définies sur le graphe à l'espace de suites $\ell^2(\mathbb{Z})$. La suite $\phi_p \in \ell^2(\mathbb{Z})$ est définie par

$$\phi_p(n) = \begin{cases} 1 - \frac{|n|}{p} & \text{si } |n| \leq p, \\ 0 & \text{si } |n| \geq p. \end{cases}$$

Pour le graphe $\mathbb{Z}^2$, on peut identifier les fonctions définies sur le graphe à l'espace de suites $\ell^2(\mathbb{Z}^2)$, la suite $\phi_p \in \ell^2(\mathbb{Z}^2)$ est définie par

$$\phi_p(n_1, n_2) = \begin{cases} 1 - \frac{\ln(1+|n_1|+|n_2|)}{\ln(p+1)} & \text{if } |n_1| + |n_2| \leq p, \\ 0 & \text{if } |n_1| + |n_2| \geq p. \end{cases}$$

Chapitre 3

Les bornes du spectre de l'opérateur de Schrödinger discret

Ce chapitre correspond à l'article publié [Ak] et étudie les fonctions spectrales de l'opérateur de Schrödinger discret $H(\lambda) := -\Delta + \lambda b$ sur $\mathbb{Z}^d$. Un des résultats principaux est la caractérisation des potentiels pour lesquels le bas du spectre de $H(\lambda)$ est strictement positif.

Lorsque la dimension $d = 1$, on retrouve le cas particulier des matrices de Jacobi (voir [Te] à ce sujet) dont la théorie spectrale a été très étudiée ces dernières années. En particulier, les travaux de R. Killip et B. Simon dans [KS] auxquels se sont joints D. Damanik et D. Hundertmark dans [DHKS] nous ont aidés à comprendre certains phénomènes en jeu dans cette étude.

Comme il est d'usage dans la littérature, c'est le Laplacien physique Δ_P introduit dans le chapitre 2 qui est utilisé dans le cas de $\mathbb{Z}^d$. Cependant, l'espace $\mathbb{Z}^d$ est un graphe particulier $2d$-régulier. Dans ce contexte, le Laplacien physique Δ_P et le Laplacien combinatoire Δ sur $\mathbb{Z}^d$ ne diffèrent que d'une constante multiplicative selon la formule suivante

$$\Delta_P = 2d\Delta$$

avec les notations du chapitre 2. Les résultats obtenus ici restent donc valables pour le Laplacien combinatoire, ce qui permet de mettre ce chapitre en relation avec le chapitre 4 qui traite des opérateurs de Schrödinger sur les graphes pondérés.

Dans la suite, nous utiliserons la notation Δ pour le Laplacien physique Δ_P introduit dans le chapitre 2.

Abstract

Let $H(\lambda) = -\Delta + \lambda b$ be a discrete Schrödinger operator on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ with a potential b and a non-negative coupling constant λ. When $b \equiv 0$, it is well known that $\sigma(-\Delta) = [0, 4d]$. Let $s(-\Delta + \lambda b) := \inf \sigma(-\Delta + \lambda b)$ and $M(-\Delta + \lambda b) := \sup \sigma(-\Delta + \lambda b)$ be the bounds of the spectrum of the Schrödinger operator when $b \not\equiv 0$.

One of the aims of this paper is to study the influence of the potential b on the bounds 0 and $4d$ of the spectrum of $-\Delta$. More precisely, we give a necessary and sufficient condition on the potential b such that $s(-\Delta + \lambda b)$ is strictly positive for λ small enough. We obtain a similar necessary and sufficient condition on the potential b such that $M(-\Delta + \lambda b)$ is lower than $4d$ for λ small enough.

In dimensions $d = 1$ and $d = 2$, the situation is more precise. The following result was proven by Killip and Simon (for $d = 1$) in [KS] then by Damanik and al. (for $d = 1$ and $d = 2$) in [DHKS].

If $\sigma(-\Delta + b) \subset [0, 4d]$, then $b \equiv 0$.

Our study on the bounds of the spectrum of $(-\Delta + b)$ allows us to give a different and easy proof to this result.

Keywords : Schrödinger operators, Spectrum, Bounds, Spectral functions.

1 Introduction

In this paper, we study some spectral properties of the discrete Schrödinger operator on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$. This work is motivated by some results obtained in the continuous case. We first give an overview of these results. Let $-\Delta$ denote the non-negative Laplace operator on $L^2(\mathbb{R}^d)$. It is well known that $-\Delta$ is self-adjoint and $\sigma(-\Delta) = [0, +\infty)$. Let $V \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$ be a real-valued potential. Then the Schrödinger operator $H := -\Delta + V$ is well defined and is self-adjoint on $L^2(\mathbb{R}^d)$. We note $s(-\Delta + V) := \inf \sigma(-\Delta + V)$ its spectral bound. A question of interest is for which potential V we have $s(-\Delta + V) > 0$. Indeed, the fact that $s(-\Delta + V) > 0$ assures an exponential decay in time of the solution to the heat equation

$$\begin{cases} \frac{\partial u(t,.)}{\partial t} = \Delta u(t,.) - Vu(t,.), \; t > 0 \\ \\ u(0,.) = f \in L^2(\mathbb{R}^d). \end{cases}$$

For bounded non-negative potentials with compact support, it is easy to see from the variational formula

$$s(-\Delta + V) = \inf_{\substack{u \in D(-\Delta+V) \\ ||u||=1}} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u|^2 + \int_{\mathbb{R}^d} Vu^2$$

that $s(-\Delta + V) = 0$. To assure the strict positivity of the spectral bound of the Schrödinger operator, the potential must have a contribution in all the space in some sense. Indeed, W. Arendt and C. Batty [AB1] proved that $s(-\Delta+V)>0$ holds if and only if the potential V satisfies the following mean condition $(M_{\delta,R})$.

$$\text{There exist } \delta>0 \text{ and } R>0 \text{ such that } \int_{B(x,R)} V \geq \delta \text{ for all } x \text{ in } \mathbb{R}^d \qquad (M_{\delta,R})$$

The hypothesis of boundedness is crucial. In fact, for unbounded non-negative potentials, this characterisation holds for $d=1$ and $V\in L^1_{loc}(\mathbb{R})$ but the situation changes for higher dimensions $(d\geq 2)$. See [AB1] for a counter-example in dimension $d=2$. See also [AB2] for more results on the asymptotic behaviour of the spectral bound of the Schrödinger operator.

Note also related results obtained by Gesztesy, Graf and Simon in [GGS]. Here, the authors are interested in the value of $s'(0)$ and their study also involves mean values of the potential.

For bounded potentials with positive and negative parts, $V=V^+-V^-$, the situation is different but the same mean condition appears. Indeed, the following result was shown by E.M. Ouhabaz [Ou1] (in a more general context of Riemannian manifolds). The spectral bound $s(-\Delta+\lambda V)$ is strictly positive for $\lambda>0$ and small enough if and only if the positive part of the potential V^+ satisfies the mean condition $(M_{\delta,R})$ (under the condition that the negative part V^- vanishes at infinity). Note that in that paper, [Ou1] gives conditions wich characterize the class of Riemannian manifolds for which the result holds. Of course, these conditions are satisfied when the manifold is $\mathbb{R}^d$. Z. Shen [Sh] proved later that this result still holds for a larger class of potentials but he only studied non-negative potentials.

The aim of this paper is to study the same problem in the discrete case. Let us first recall the definition of the discrete positive Laplacian $-\Delta$ on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$. For all n in $\mathbb{Z}^d$, we define :

$$-\Delta(u)(n) := \sum_{\substack{m\in\mathbb{Z}^d\\|m-n|=1}} (u_n-u_m) := 2du_n - \sum_{\substack{m\in\mathbb{Z}^d\\|m-n|=1}} u_m.$$

The operator $-\Delta$ is bounded and self-adjoint on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$. It is well known that $\sigma(-\Delta)=\sigma_{ess}(-\Delta)=[0,4d]$ (see [Te] p.20 for d=1, the generalization is easy). Note that unlike the continuous case, the spectrum of the discrete Laplacian has two sides.

For a bounded potential $b:\mathbb{Z}^d\longrightarrow\mathbb{R}$, the discrete Schrödinger operator is defined on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$. For all n in $\mathbb{Z}^d$, we set :

$$H(u)(n) := (-\Delta+b)(u)(n) := \sum_{\substack{m\in\mathbb{Z}^d\\|m-n|=1}} (u_n-u_m)+b_nu_n.$$

Some of our results hold for unbounded potentials $b:\mathbb{Z}^d\longrightarrow\mathbb{R}$. In that case, we will define the Schrödinger operator using the quadratic form technique.

In this discrete context, we want to study the influence of the potential b on the bounds 0 and $4d$ of the spectrum of $-\Delta$. More precisely, we want to know for which potentials b we have $s(-\Delta+b) := \inf \sigma(-\Delta+b) > 0$ or $M(-\Delta+b) := \sup \sigma(-\Delta+b) < 4d$.

For vanishing non-negative potentials b, it is easy to see that $s(-\Delta+b) = 0$. Indeed, in that case, the multiplication operator $M_b : u_n \longrightarrow b_n u_n$ is compact. Then, by Weyl's theorem, $\sigma_{ess}(-\Delta+b) = \sigma_{ess}(-\Delta) = [0, 4d]$. Since b is non-negative, we obtain $s(H) = 0$. As remarked in the continuous case, the potential must have a contribution in all the space.

With the notations of definition 3.3.1, we will say that $b = (b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$ if

$$\text{there exists } \delta > 0 \text{ and } N \in \mathbb{N} \text{ such that, for all } k \in \mathbb{Z}^d, \sum_{i=k}^{k+N-1} b_i \geq \delta \qquad (M_{\delta,N})$$

Concerning the spectral bounds $s(\lambda) := s(-\Delta+\lambda b)$ and $M(\lambda) := M(-\Delta+\lambda b)$, we prove the following results.

Theorem 3.1.1. *Let $H(\lambda) = -\Delta + \lambda b$ be a discrete Schrödinger operator with a (bounded or unbounded) potential $b = (b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ which may change sign and a non-negative coupling constant λ. The following assertions are equivalent.*

(1) *$s(\lambda) > 0$ for $\lambda \in (0, \epsilon)$ for some $\epsilon > 0$,*

(2) *the potential b is bounded from below and satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$.*

Theorem 3.1.2. *i) The following assertions are equivalent.*

(1) *$M(\lambda) < 4d$ for $\lambda \in (0, \epsilon)$ for some $\epsilon > 0$,*

(2) *the potential $-b$ satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$.*

ii) If the potential b satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$, then $M(\lambda) > 4d$, for all $\lambda > 0$.

As a consequence of Theorems 3.1.1 and 3.1.2, we show in Corollary 3.3.10 that the spectral bounds satisfy :

$$M(\lambda) - s(\lambda) \geq 4d \text{ for all } \lambda \geq 0.$$

The idea of the proof of Theorem 3.1.1 is to divide the space over adapted cubes and to study the "restrictions" of the operator on these cubes. We show that each restriction has a spectral bound uniformely bounded from below. The uniformity and the good recovering of the space provide the strict positivity of the spectral bound of the operator on the whole space. In that sense, the idea of our proof is similar to the one given in [Ou1] even if the tools used are quite different.

The first part of Theorem 3.1.2 is easily deduced from Theorem 3.1.1. Indeed, using an idea from [DHKS], we can find a simple relation between $M(-\Delta+\lambda b)$ and $s(-\Delta-\lambda b)$. Precisely, if we consider the unitary operator U on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ given by $(U\phi)(n) = (-1)^{|n|}\phi(n)$, it is easy to see that $U(-\Delta+\lambda b)U^{-1} = (-\Delta-\lambda b) + 4d$.

In dimension $d = 1$, the Schrödinger operator can be seen as a special Jacobi matrix, that is, infinite tridiagonal matrix whose elements are equal to $2 + b_i$ on the main diagonal and to -1 on the lower and upper sub-diagonals. The interest of the dimension one is also the profusion of results related to the Jacobi matrices. General properties of Jacobi matrices are studied in the book of G. Teschl [Te]. The spectral properties of Jacobi matrices have been a subject of interest for the past years (e.g [KS], [K1], [K2], [LNS]). In particular, the following result on the spectrum of the discrete Schrödinger operator on $\ell^2(\mathbb{Z})$ was proved by R. Killip and B. Simon in [KS] and later extended to dimension $d = 2$ by Damanik and al. in [DHKS]. They also provide a counter-example for higher dimensions ($d \geq 3$).

Theorem 3.1.3. *([DHKS]) For $d = 1, 2$, let $H = -\Delta + b$ be the discrete Schrödinger operator on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$.*

If $\sigma(H) \subset [0, 4d]$ then $b \equiv 0$.

The proof in [DHKS] uses the fact that the spectrum of the discrete Schrödinger operator has two sides. The authors prove that if $-\Delta + b$ has no spectrum outside $[0, 4d]$, neither does $-\Delta + (4d)^{-1} b^2$. Then, the problem is reduced to the more simple case of non-negative potentials. We shall give a new proof of this theorem. It is based on our study of the spectral bounds $s(-\Delta + b)$ and $M(-\Delta + b)$.

This paper is organized as follows. In section 2, we recall some basic facts and we develop technical preliminaries useful for the proofs of our results. In section 3, we prove the main theorems and study the behaviour of the spectral functions $s(-\Delta + \lambda b)$ and $M(-\Delta + \lambda b)$. In the last section, we give a new proof of Theorem 3.1.3 and we revisit our results for dimensions $d = 1$ or 2.

Acknowledgements I would like to thank Frederic Bayart and Jean-françois Bony for useful comments and El Maati Ouhabaz for his precious help.

2 Preliminaries and notation

In this section, we recall some well known facts about the discrete Laplacian and we compute usefull relations about the discrete Schrödinger operator. In particular, Proposition 3.2.5 will be the key point in the proofs of our results. Moreover, Remark 3.2.6 illustrates this result in the more intuitive case of dimension 1. We encourage the reader to refer to this case in order to help the understanding of the notations (more complex in dimension d) and the meaning of this result.

But first, we recall the min-max principle [RS], which is the main tool we use to compute the spectral bounds. Let A be an unbounded self-adjoint operator with domain $D(A)$. We note $\sigma(A)$ its spectrum, $s(A) := \inf \sigma(A)$ the bottom of its spectrum and $M(A) := \sup \sigma(A)$ the top of its spectrum ($M(A) \leq +\infty$). If A is bounded from below, then, by the min-max principle, we have

$$s(A) = \inf_{\substack{u\in D(A)\\ ||u||=1}} \langle Au, u\rangle \text{ and } M(A) = \sup_{\substack{u\in D(A)\\ ||u||=1}} \langle Au, u\rangle,$$

where $\langle u, v\rangle := \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} u_n v_n$ is the usual scalar product in $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ and $||u|| = \sqrt{\langle u, u\rangle}$. Moreover, if A is defined with the quadratic form technique using the bilinear form a (see [Ou2]), we also have :

$$s(A) = \inf_{\substack{u\in D(a)\\ ||u||=1}} a(u, u) \text{ and } M(A) = \sup_{\substack{u\in D(a)\\ ||u||=1}} a(u, u).$$

Note that for a sequence $(u_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$, we will sometimes write $u(n)$ for u_n.

The discrete Laplacian In dimension 1, the discrete non-negative Laplacian $-\Delta$ is a bounded operator on $\ell^2(\mathbb{Z})$. We have : for all n in $\mathbb{Z}$,

$$-\Delta u(n) = -u_{n-1} + 2u_n - u_{n+1}.$$

The discrete gradient ∇ in dimension 1 is a bounded operator on $\ell^2(\mathbb{Z})$. We have : for all $n \in \mathbb{Z}$, $\nabla u(n) = u_{n+1} - u_n$.

An easy computation shows that the adjoint operator of ∇ is defined on $\ell^2(\mathbb{Z})$ by : for all $n \in \mathbb{Z}$, $\nabla^* u(n) = u_{n-1} - u_n$.

It is then easy to check that $-\Delta$ is a self-adjoint operator satisfying : for all n in $\mathbb{Z}$,

$$\nabla^*\nabla u(n) = \nabla\nabla^* u(n) = -\Delta u(n).$$

In dimension $d \geq 1$, the operator $-\Delta$ is bounded on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ and is defined by : for all n in $\mathbb{Z}^d$,

$$-\Delta u(n) := \sum_{m\in\mathbb{Z}^d, |m-n|=1} (u_n - u_m) := 2du_n - \sum_{m\in\mathbb{Z}^d, |m-n|=1} u_m,$$

where $|m - n| := \sum_{i=1,\ldots,d} |m_i - n_i|$ for $m = (m_1, \ldots, m_d)$, $n = (n_1, \ldots, n_d) \in \mathbb{Z}^d$. A straightforward computation shows that : $-\Delta u(n) = \sum_{i=1}^{d} -\Delta^i u(n)$, where for all i in $[1, \ldots, d]$, the operator $-\Delta^i$ represents the i-second derivative and is defined on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$: for all $n = (n_1, \ldots, n_d)$ in $\mathbb{Z}^d$, we have

$$-\Delta^i u(n) = -u_{n_1,\ldots,n_{i-1},n_i-1,n_{i+1},\ldots,n_d} + 2u_n - u_{n_1,\ldots,n_{i-1},n_i+1,n_{i+1},\ldots,n_d}.$$

Now we define for all i in $[1, \ldots, d]$ the discrete i-partial derivative ∇^i : for all n in

$\mathbb{Z}^d$,

$$\nabla^i u(n) = u_{n_1,\dots,n_{i-1},n_i+1,n_{i+1},\dots,n_d} - u_n.$$

The study of the one dimensional case clearly implies that, for all i in $[1,\dots,d]$, we have

$$-\Delta^i = \nabla^{i*}\nabla^i.$$

Since we will use the min-max principle in our proofs, we need to compute the quadratic form $\langle -\Delta u, u\rangle$. The next proposition is a well known fact of straightforward computation.

Proposition 3.2.1. *For all u in $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$, for all n in $\mathbb{Z}^d$, we note $|\nabla u(n)|^2 := \sum_{i=1}^{d} |\nabla^i u(n)|^2$.*

We have $\langle -\Delta u, u\rangle = \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} |\nabla u(n)|^2$.

As mentioned in the introduction, the main idea of our proof is to divide the space over some cubes and to work on the "restrictions" of the Schrödinger operator. In particular, our strategy is to write the quadratic form of the operator $-\Delta$ as a sum of quadratic forms of finite dimension. Let us introduce some notations.

Let N be fixed in $\mathbb{N}$. For all $k = (k_1,\dots,k_d) \in \mathbb{Z}^d$, we define the cubes :

1. $C_{N+1}^k := \left\{ p \in \mathbb{Z}^d \text{ such that } p \in \prod_{i=1}^{d} [k_i N, (k_i+1)N] \right\}$ of size $(N+1)^d$,
2. $C_N^k := \left\{ p \in \mathbb{Z}^d \text{ such that } p \in \prod_{i=1}^{d} [k_i N, (k_i+1)N - 1] \right\}$ of size N^d.

Note that the cubes C_{N+1}^k are interfering with the $3^d - 1$ adjacent cubes and that the cubes C_N^k form a partition of $\mathbb{Z}^d$: $\mathbb{Z}^d = \bigcup_{k\in\mathbb{Z}^d} C_N^k$.

Let $u = (u_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ be a sequence in $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$. For all $k = (k_1,\dots,k_d) \in \mathbb{Z}^d$, we note u_{N+1}^k the vector in $\mathbb{R}^{(N+1)^d}$ which is the restriction of the sequence u to the cube C_{N+1}^k. For all $l = (l_1,\dots,l_d)$ in $[0,\dots,N]^d$, we then have $u_{N+1}^k(l_1,\dots,l_d) = u(k_1 N + l_1,\dots,k_d N + l_d)$.

Let us now introduce the finite dimensional operator $-\Delta_{N+1}$ acting on $\mathbb{R}^{(N+1)^d}$ via its associated quadratic form. Precisely, for all $x = (x_{p_1,\dots,p_d})_{0\le p_1,\dots,p_d\le N} \in \mathbb{R}^{(N+1)^d}$, we define :

$$\langle -\Delta_{N+1} x, x\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} := \sum_{p\in[0,N-1]^d} |\nabla_{N+1} x(p)|^2,$$

where

$$|\nabla_{N+1} x(p)|^2 = \sum_{i=1}^{d} |\nabla_{N+1}^i x(p)|^2,$$

and

$$\nabla^i_{N+1} x(p) = \begin{cases} x_{p_1,\dots,p_{i-1},p_i+1,p_{i+1},\dots,p_d} - x_p & \text{if } 0 \le p_i \le N-1, \\ 0 & \text{if } p_i = N. \end{cases}$$

Think of $-\Delta_{N+1}$ as the restriction of the Laplacian on a cube of size $(N+1)^d$. We are now ready to give some properties of the quadratic form of $-\Delta_{N+1}$. The third point will be the key in the proof of our results.

Proposition 3.2.2. *1. For all x in $\mathbb{R}^{(N+1)^d}$, $\langle -\Delta_{N+1} x, x\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} \ge 0$.*

2. $Ker(-\Delta_{N+1}) = \mathbb{R}\mathbb{1}$ where $\mathbb{1}$ is the vector in $\mathbb{R}^{(N+1)^d}$ with all components equal to 1.

3. $\langle -\Delta u, u\rangle_{\ell^2(\mathbb{Z}^d)} = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} \langle -\Delta_{N+1} u^k_{N+1}, u^k_{N+1}\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}$, where the vector $u^k_{N+1} \in \mathbb{R}^{(N+1)^d}$ is the restriction of the sequence $u \in \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ to the cube C^k_{N+1}.

Proof. 1. This is clear.

2. Let $x \in Ker(-\Delta_{N+1})$. Since the quadratic form $\langle -\Delta_{N+1} z, z\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}$ is non-negative, it is well known that $Ker(-\Delta_{N+1})$ coincides with the isotropic cone $\langle -\Delta_{N+1} z, z\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}$. We then have

$$\langle -\Delta_{N+1} x, x\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} := \sum_{p\in[0,N-1]^d} \sum_{i=1}^{d} |\nabla^i_{N+1} x(p)|^2 = 0.$$

Therefore, we have $x_{p_1,\dots,p_{i-1},p_i+1,p_{i+1},\dots,p_d} = x_p$ for all $i \in [1,d]$ and for all $p \in [0,N-1]^d$. Then x is a constant vector in $\mathbb{R}^{(N+1)^d}$.

3. By Proposition 3.2.1, we have $\langle -\Delta u, u\rangle = \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} |\nabla u(n)|^2$. Since $\left(C^k_N\right)_{k\in\mathbb{Z}^d}$ form a partition of $\mathbb{Z}^d$, we can divide the first sum over the cubes $\left(C^k_N\right)_{k\in\mathbb{Z}^d}$ and we obtain

$$\langle -\Delta u, u\rangle = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} \sum_{p\in C^k_N} |\nabla u(p)|^2 = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} \sum_{p\in C^k_N} \sum_{i=1}^{d} |\nabla^i u(p)|^2.$$

For all $p \in C^k_N$, there exists $l = (l_1,\dots,l_d)$ in $[0,\dots,N-1]^d$ such that we can write $p = (k_1 N + l_1, \dots, k_d N + l_d)$. Then, by definition of u^k_{N+1}, we have $u^k_{N+1}(l) = u(p)$. Moreover, by definition of ∇^i_{N+1}, we have for all i in $[1,\dots,d]$: $\nabla^i_{N+1} u^k_{N+1}(l) = \nabla^i u(p)$. Therefore, we can write :

$$\sum_{p\in C^k_N} \sum_{i=1}^{d} |\nabla^i u(p)|^2 = \sum_{l\in[0,\dots,N-1]^d} \sum_{i=1}^{d} |\nabla^i_{N+1} u^k_{N+1}(l)|^2 = \sum_{l\in[0,\dots,N-1]^d} |\nabla_{N+1} u^k_{N+1}(l)|^2.$$

Now, by definition of $-\Delta_{N+1}$, we have

$$\langle -\Delta u, u\rangle_{\ell^2(\mathbb{Z}^d)} = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} \langle -\Delta_{N+1} u^k_{N+1}, u^k_{N+1}\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}.$$

$\square$

Remark 3.2.3. *1. Even though we divided $\mathbb{Z}^d$ over the cubes C_N^k, each quadratic form associated to $-\Delta_{N+1}$ is acting on the restriction of u on C_{N+1}^k because of the terms u_p with $p = (k_1 N + l_1, \ldots, k_d N + l_d)$ and one $l_i = N - 1$.*

2. The vectors $u_{N+1}^k \in \mathbb{R}^{(N+1)^d}$ are the restrictions of the sequence $u \in \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ to the cubes C_{N+1}^k. Since these cubes are interfering, the vectors u_{N+1}^k have some components in common (the ones in the bounds of the cubes). As a consequence, we have $\sum_{k \in \mathbb{Z}^d} ||u_{N+1}^k||^2_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} \geq ||u||^2_{\ell^2(\mathbb{Z}^d)}$.

The discrete Schrödinger operator When the potential b is bounded, we note $H(\lambda) := -\Delta + \lambda b$ the discrete Schrödinger operator on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ with a non-negative coupling constant λ. Then, we have, for all n in $\mathbb{Z}^d$:

$$H(\lambda) u(n) := \sum_{m \in \mathbb{Z}^d, |m-n|=1} (u_n - u_m) + \lambda b_n u_n.$$

When the potential b is unbounded, we use the quadratic form technique to define the Schrödinger operator $H(\lambda)$. Let us consider an unbounded potential : $b = (b_n)_{n \in \mathbb{Z}^d} : b = b^+ - b^-$. We assume that $b^- \in \ell^\infty(\mathbb{Z}^d)$. Let h^λ be the bilinear form defined on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ by :

$$h^\lambda(u, v) = \sum_{i=1}^{d} \left\langle \nabla^i u, \nabla^i v \right\rangle + \lambda \left\langle b^+ u, v \right\rangle - \lambda \left\langle b^- u, v \right\rangle,$$

with domain

$$D\left(h^\lambda\right) = \left\{ u \in \ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right) \text{ such that } \sum_{n \in \mathbb{Z}^d} b_n^+ u_n^2 < +\infty \right\}.$$

Since b^- is bounded, we obtain easily that h^λ is bounded from below. Moreover, h^λ is densely defined, continuous and closed. Therefore, we can associate to h^λ a self-adjoint operator $H(\lambda)$, defined as follows (see [Ou2]) :

$$\begin{aligned} D(H(\lambda)) = \{ u \in D\left(h^\lambda\right) \text{ such that there exists } v \in \ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right) \text{ such that} \\ h^\lambda(u, \phi) = \langle v, \phi \rangle, \text{ for all } \phi \in D\left(h^\lambda\right) \}, \end{aligned}$$

and for $u \in D(H(\lambda))$, we have $H(\lambda) u = v$.

It is easy to check that for u and ϕ in $D\left(h^\lambda\right)$, we have : $h^\lambda(u, \phi) = \langle -\Delta u + \lambda b u, \phi \rangle$. Therefore, for all u in $D(H(\lambda))$, we have $H(\lambda) u = (-\Delta + \lambda b) u$. For the rest of the paper, we will use the quadratic form h^λ in place of the operator $H(\lambda)$ if we need to.

Remark 3.2.4. *1. When $\phi = u$, the previous formula becomes :*

$$h^{\lambda}(u,u) = \langle -\Delta u, u\rangle + \lambda \langle bu, u\rangle .$$

2. Note that since $-\Delta$ is a bounded operator, we can define the Schrödinger operator $H(\lambda) = -\Delta + \lambda b$ as a perturbation of the potential $b = b^{+} - b^{-}$. The domain of the operator $H(\lambda)$ is $D(H(\lambda)) = D(b) = \left\{u \in \ell^2(\mathbb{Z}^d), \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} b_n^2 u_n^2 < +\infty\right\}$ wich is dense in $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$. Moreover, $H(\lambda)$ is bounded from below if and only if b^{-} is bounded from below.

Let us now compute the quadratic form $h^{\lambda}(u,u)$ for u in $D\left(h^{\lambda}\right)$ in order to use the min-max principle. In particular, we will give an expression of $h^{\lambda}(u,u)$ as a sum of quadratic forms of finite dimension. Let us first introduce some notations.

For N in $\mathbb{N}$ and k in $\mathbb{Z}^d$, we introduce the finite dimensional operator $H^k_{N+1}(\lambda)$ acting on $\mathbb{R}^{(N+1)^d}$ via its associated quadratic form. Precisely, we define for all $x = (x_{p_1,\ldots,p_d})_{0\le p_1,\ldots,p_d\le N} \in \mathbb{R}^{(N+1)^d}$:

$$\left\langle H^k_{N+1}(\lambda)\, x, x\right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} := \langle -\Delta_{N+1}(\lambda)\, x, x\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} + \lambda \left\langle B^k_{N+1} x, x\right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} ,$$

where the operator B^k_{N+1} is defined on $\mathbb{R}^{(N+1)^d}$ as follows :

for all $p \in [0,N]^d$, we note $kN + p := (k_1 N + p_1, \ldots, k_d N + p_d)$ and we define

$$\left(B^k_{N+1} x\right)(p) = \begin{cases} b_{kN+p}\, x_p & \text{if } p \in [0,N-1]^d \text{ that is if } (kN+p) \in C^k_N \\ 0 & \text{if } p \in [0,N]^d \setminus [0,N-1]^d \text{ that is if } (kN+p) \in C^k_{N+1} \backslash C^k_N. \end{cases}$$

Note that even though the operator B^k_{N+1} is defined on the cube C^k_{N+1}, it represents the potential b only on the cube C^k_N. We define it this way in order to restitute the potential b is the whole space using the partition $\mathbb{Z}^d = \bigcup_{k\in\mathbb{Z}^d} C^k_N$ without counting any element b_i more than one time.

We can now enonciate the principal result of this section which will be the starting point to the proofs of our results.

Proposition 3.2.5. *For all u in $D\left(h^{\lambda}\right)$, we have*

$$h^{\lambda}(u,u) = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} \left\langle H^k_{N+1}(\lambda)\, u^k_{N+1}, u^k_{N+1}\right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} .$$

Proof. By Remark 3.2.4 and Proposition 3.2.2, we have

$$h^{\lambda}(u,u) = \langle -\Delta u, u\rangle + \lambda\langle bu, u\rangle = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d} \left\langle -\Delta_{N+1} u^k_{N+1}, u^k_{N+1}\right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} + \lambda \langle bu, u\rangle .$$

Since $\mathbb{Z}^d = \bigcup_{k\in\mathbb{Z}} C_N^k$, we can write

$$\langle bu, u\rangle = \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} b_n u_n^2 = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d}\sum_{p\in C_N^k} b_p u_p^2 = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d}\sum_{l\in[0,\dots,N-1]^d} b\left(kN+l\right) u\left(kN+l\right)^2 .$$

By definition of u_{N+1}^k, we have $u\left(kN+l\right) = u_{N+1}^k\left(l\right)$ for all $l \in [0,\dots,N]^d$. Then, we have

$$\langle bu, u\rangle = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d}\sum_{l\in[0,\dots,N-1]^d} b\left(kN+l\right) u_{N+1}^k\left(l\right)^2 = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d}\left\langle B_{N+1}^k u_{N+1}^k, u_{N+1}^k\right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} .$$

Finally, we find that

$$\begin{aligned} h^\lambda\left(u,u\right) &= \sum_{k\in\mathbb{Z}^d}\left\langle -\Delta_{N+1} u_{N+1}^k, u_{N+1}^k\right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} + \lambda\sum_{k\in\mathbb{Z}^d}\left\langle B_{N+1}^k u_{N+1}^k, u_{N+1}^k\right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} \\ &= \sum_{k\in\mathbb{Z}^d}\left\langle H_{N+1}^k\left(\lambda\right) u_{N+1}^k, u_{N+1}^k\right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} . \end{aligned}$$

□

This representation is crucial because it reduces our problem into a problem in finite dimension with the quadratic forms of $H_{N+1}^k\left(\lambda\right)$.

Remark 3.2.6. *In one dimension, the notations are simplified and the comprehension is more intuitive. Indeed, it that case, we have a matrix representation for the operators. In particular, the Schrödinger operator is an infinite tridiagonal matrix whose elements are equal to $2+b_i$ on the main diagonal and to -1 on the lower and upper sub-diagonals. Moreover, it is easy to compute H_{N+1}^k as a finite dimensional matrix of size $N+1$. We have*

$$H_{N+1}^k = \begin{pmatrix} 1+b_{kN} & -1 & 0 & & \\ -1 & 2+b_{kN+1} & \ddots & & \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & \ddots & 2+b_{(k+1)N-1} & -1 \\ & & 0 & -1 & 1 \end{pmatrix} .$$

The idea of Proposition 3.2.5 is more intuitive in dimension one. Indeed, we can illustrate the relation $\langle Hu, u\rangle = \sum_{k\in\mathbb{Z}^d}\left\langle H_{N+1}^k u_{N+1}^k, u_{N+1}^k\right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}$ as in Figure 3.1. In particular, since each matrix H_{N+1}^k is interfering with the adjacent ones, they complement each other at their corners to cover exactly the infinite matrix H.

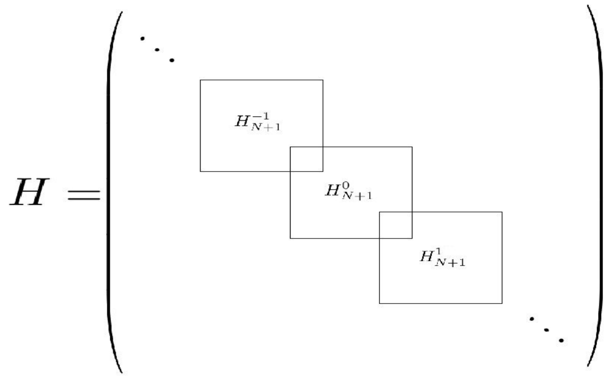


FIGURE 3.1 – Partition of the infinite Jacobi matrix H.

3 The spectral bounds

In this section, we prove our main result on the bounds of the spectrum of the discrete Schrödinger operator. Before we start, we recall the definition of the mean condition $(M_{\delta,N})$.

Definition 3.3.1. *We say that the potential $(b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$ for some $\delta>0$ and $N\in\mathbb{N}$ if*

$$\text{there exists } \delta>0 \text{ and } N\in\mathbb{N} \text{ such that, for all } k\in\mathbb{Z}^d,\ \sum_{i=k}^{k+N-1} b_i \geq \delta \qquad (M_{\delta,N})$$

where for $k=(k_1,\dots,k_d)\in\mathbb{Z}^d$ and $N\in\mathbb{N}$, $k+N-1:=(k_1+N-1,\dots,k_d+N-1)$ and $\displaystyle\sum_{i=k}^{k+N-1} := \sum_{i_1=k_1}^{k_1+N-1}\sum_{i_2=k_2}^{k_2+N-1}\cdots\sum_{i_d=k_d}^{k_d+N-1}$.

Remark 3.3.2.
1. *If $b_n \underset{|n|\to\infty}{\longrightarrow} 0$, then $(b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ doesn't satisfy the condition $(M_{\delta,N})$.*
2. *If $(b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ satisfies $(M_{\delta,N})$, the inequality is satisfied in particular on all the cubes $\left(C_N^k\right)_{k\in\mathbb{Z}^d}$: for all $k\in\mathbb{Z}^d$, $\displaystyle\sum_{C_N^k} b_i\geq\delta$.*
3. *If $(b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ satisfies the condition $(M_{\delta,N})$, then $(-b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ doesn't satisfy the condition $(M_{\eta,M})$ for any $\eta>0$ and $M\in\mathbb{N}$.*

3.1 The bottom of the spectrum

We prove the following result about the bottom of the spectrum $s(\lambda)$ of $H(\lambda)$.

Theorem 3.3.3. *Let $H(\lambda)=-\Delta+\lambda b$ be a discrete Schrödinger operator with a possibly unbounded potential $(b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$: $b_n=b_n^+-b_n^-$ and a non-negative coupling constant λ. We assume that $b^-\in\ell^\infty\left(\mathbb{Z}^d\right)$.*

1. *The following assertions are equivalent.*
   (1) $s(\lambda) := s(-\Delta + \lambda b) > 0$ *for* $\lambda \in (0, \epsilon)$ *and some* $\epsilon > 0$,
   (2) *the potential* b *satisfies the mean condition* $(M_{\delta,N})$.
2. *In particular, if the potential* $b_n = b_n^+$ *is non-negative, the following assertions are equivalent.*
   (1) $s(\lambda) > 0$ *for all* $\lambda > 0$,
   (2) *the potential* b *satisfies the mean condition* $(M_{\delta,N})$.

Remark 3.3.4. *If we define the Schrödinger operator as in remark 3.2.4, we can rephrase Theorem 3.3.3 as follows.*

Let $H(\lambda) = -\Delta + \lambda b$ *be a discrete Schrödinger operator with a possibly unbounded potential* $(b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ *and a non-negative coupling constant* λ*. The following assertions are equivalent.*
(1) $s(\lambda) := s(-\Delta + \lambda b) > 0$ *for* $\lambda \in (0, \epsilon)$ *and some* $\epsilon > 0$,
(2) *the potential* b *is bounded from below and satisfies the mean condition* $(M_{\delta,N})$.

We will need the following lemma which deals with bounded potentials. It shows that for λ small enough, the quadratic forms of $H_{N+1}^k(\lambda)$ introduced in the previous section are uniformely bounded from below when the potential b is bounded and satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$.

Lemma 3.3.5. *We suppose that the potential* b *is bounded and satisfies the mean condition* $(M_{\delta,N})$*. Then, there exists* $C_{\delta,N} > 0$*, there exists* $\epsilon > 0$*, such that for all* $\lambda \in (0, \epsilon)$*, for all* $k \in \mathbb{Z}^d$*,*

$$\left\langle H_{N+1}^k(\lambda)\, x, x\right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} \geq \lambda C_{\delta,N} ||x||^2_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}, \qquad \textit{for all } x \in \mathbb{R}^{(N+1)^d}.$$

The constants $C_{\delta,N}$ *and* ϵ *are independent of* k.

Proof. of Lemma 3.3.5. In this proof, we will write $\langle .,.\rangle$ for $\langle .,.\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}$ and $||.||$ for $||.||_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}$.

By definition of $H_{N+1}^k(\lambda)$ (see Section 2), we have

$$\left\langle H_{N+1}^k(\lambda)\, x, x\right\rangle = \langle -\Delta_{N+1} x, x\rangle + \lambda \left\langle B_{N+1}^k x, x\right\rangle.$$

Proposition 3.2.2 assures that $Ker(-\Delta_{N+1}) = \mathbb{R}\mathbb{1}$ where $\mathbb{1}$ is the vector in $\mathbb{R}^{(N+1)^d}$ with all components equal to 1. We use the decomposition : $\mathbb{R}^{(N+1)^d} = \mathbb{R}\mathbb{1} \oplus (\mathbb{R}\mathbb{1})^\perp$ and write, for all x in $\mathbb{R}^{(N+1)^d}$, $x = \alpha\mathbb{1} + y$ with $\alpha \in \mathbb{R}$ and $y \in (\mathbb{R}\mathbb{1})^\perp$. Then, we have

$$\left\langle H_{N+1}^k(\lambda)\, x, x\right\rangle = \langle -\Delta_{N+1}(\alpha\mathbb{1} + y), \alpha\mathbb{1} + y\rangle + \lambda \left\langle B_{N+1}^k(\alpha\mathbb{1} + y), \alpha\mathbb{1} + y\right\rangle.$$

Since $\mathbb{1} \in Ker(-\Delta_{N+1})$ and $-\Delta_{N+1}$ is symmetric, we have

$$\left\langle H_{N+1}^k(\lambda)\, x, x\right\rangle = \langle -\Delta_{N+1} y, y\rangle + \lambda \left[\alpha^2 \left\langle B_{N+1}^k \mathbb{1}, \mathbb{1}\right\rangle + 2\alpha \left\langle B_{N+1}^k \mathbb{1}, y\right\rangle + \left\langle B_{N+1}^k y, y\right\rangle\right].$$

Note that :

1. By Proposition 3.2.2, $-\Delta_{N+1}$ is a non-negative operator with kernel $\mathbb{R}\mathbb{1}$, then it is positive definite on $(\mathbb{R}\mathbb{1})^{\perp}$. So, there exists $\eta > 0$ such that, for all $k \in \mathbb{Z}^d$, for all $z \in (\mathbb{R}\mathbb{1})^{\perp}$, $\langle -\Delta_{N+1} z, z\rangle \geq \eta ||z||^2$. The constant η doesn't depend on k because $-\Delta_{N+1}$ doesn't.

2. Using the condition $(M_{\delta,N})$, we have $\left\langle B_{N+1}^k \mathbb{1}, \mathbb{1}\right\rangle = \sum\limits_{p_1,\dots,p_d=0}^{N-1} b_{kN+p} \geq \delta$.

Using these remarks and the Cauchy-Schwarz inequality for the terms $\left\langle B_{N+1}^k \mathbb{1}, y\right\rangle$ and $\left\langle B_{N+1}^k y, y\right\rangle$, we have

$$\begin{aligned}\left\langle H_{N+1}^k(\lambda)\, x, x\right\rangle &\geq \eta ||y||^2 + \lambda \left[\alpha^2\delta - 2\alpha ||B_{N+1}^k \mathbb{1}||\,||y|| - ||B_{N+1}^k y||\,||y||\right] \\ &\geq \eta ||y||^2 + \lambda\left[\alpha^2\delta - 2\alpha ||b||_\infty ||\mathbb{1}||\,||y|| - ||b||_\infty ||y||^2\right].\end{aligned}$$

For $\gamma > 0$ to be choosen, we use the well known formula : $2ts \leq \left(\gamma t^2 + \frac{1}{\gamma}s^2\right)$ with $t = \alpha||\mathbb{1}||$ and $s = ||y||$. We then have

$$\begin{aligned}\left\langle H_{N+1}^k(\lambda)\, x, x\right\rangle &\geq \eta ||y||^2 + \lambda\left[\alpha^2\delta - ||b||_\infty \left(\gamma\alpha^2 ||\mathbb{1}||^2 + \frac{1}{\gamma}||y||^2 - ||y||^2\right)\right] \\ &\geq \left[\eta - \lambda ||b||_\infty \left(1 + \frac{1}{\gamma}\right)\right] ||y||^2 + \lambda\left[\frac{\delta}{||\mathbb{1}||^2} - ||b||_\infty \gamma\right]\alpha^2 ||\mathbb{1}||^2.\end{aligned}$$

Now, we choose $\gamma = \frac{\delta}{2||\mathbb{1}||^2 ||b||_\infty} > 0$ so that $\frac{\delta}{||\mathbb{1}||^2} - ||b||_\infty\gamma = \frac{\delta}{2||\mathbb{1}||^2}$. As $\eta > 0$, we have for λ small enough : $\eta - \lambda||b||_\infty\left(1 + \frac{1}{\gamma}\right) \geq \lambda\frac{\delta}{2||\mathbb{1}||^2}$. Thus, for this choice of γ and for λ small enough, we have

$$\left\langle H_{N+1}^k(\lambda)\, x, x\right\rangle \geq \lambda\frac{\delta}{2||\mathbb{1}||^2}\left(||y||^2 + ||\alpha\mathbb{1}||^2\right) = \lambda\frac{\delta}{2||\mathbb{1}||^2}||x||^2.$$

Since δ and $||\mathbb{1}||^2 = (N+1)^d$ are two constants not depending on k, we finally find that there exists $C_{\delta,N} = \frac{\delta}{2||\mathbb{1}||^2} = \frac{\delta}{2(N+1)^d} > 0$, there exists $\epsilon > 0$, not depending on k, such that, for all $\lambda \in (0,\epsilon)$, for all $k \in \mathbb{Z}^d$,

$$\left\langle H_{N+1}^k(\lambda)\, x, x\right\rangle \geq \lambda C_{\delta,N} ||x||^2.$$

□

Proof. *of Theorem 3.3.3.*

We prove assertion 1.

Sufficiency of the mean condition We suppose that the potential b satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$. We first treat the special case of bounded potentials. By

Proposition 3.2.5, we can write for all u in $\ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right)$:

$$h^\lambda(u,u)=\sum_{k\in\mathbb{Z}^d}\left\langle H^k_{N+1}(\lambda)\,u^k_{N+1},u^k_{N+1}\right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}.$$

Now, using Lemma 3.3.5, there exists a constant $C_{\delta,N}=\frac{\delta}{2(N+1)^d}>0$ depending only on δ and N, there exists $\epsilon>0$, such that for all $\lambda\in(0,\epsilon)$, we have

$$\left\langle H^k_{N+1}(\lambda)\,u^k_{N+1},u^k_{N+1}\right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}\geq\lambda C_{\delta,N}||u^k_{N+1}||^2_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}.$$

Since $C_{\delta,N}$ doesn't depend on k, we have, for all $\lambda\in(0,\epsilon)$

$$\begin{aligned}h^\lambda(u,u)&\geq\sum_{k\in\mathbb{Z}^d}\lambda C_{\delta,N}||u^k_{N+1}||^2_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}\\&\geq\lambda C_{\delta,N}\sum_{k\in\mathbb{Z}^d}||u^k_{N+1}||^2_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}\\&\geq\lambda C_{\delta,N}||u||^2_{\ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right)}.\end{aligned}$$

The last inequality is due to the fact that $\sum_{k\in\mathbb{Z}^d}||u^k_{N+1}||^2_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}\geq||u||^2_{\ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right)}$, as noted in Remark 3.2.3. Now, the result follows using the min-max principle. For all $\lambda\in(0,\epsilon)$, we have

$$s(\lambda):=\inf_{\substack{u\in D\left(h^\lambda\right)\\||u||=1}}h^\lambda(u,u)\geq\lambda C_{\delta,N}>0.$$

Let us now see how we can extend the above result to unbounded potentials. We then suppose that the potential b is unbounded and satisfies the assumptions of the theorem. The idea is to truncate the potential with an appropriate constant. Let $M:=\left(N^d-1\right)||b^-||_\infty+\delta$. Writing $b_n=\min(b_n,M)+\max((b_n-M),0)$, we have

$$\begin{aligned}h^\lambda(u,u)&=\sum_{n\in\mathbb{Z}^d}|\nabla u(n)|^2+\lambda\sum_{n\in\mathbb{Z}^d}b_nu_n^2\\&=\sum_{n\in\mathbb{Z}^d}|\nabla u(n)|^2+\lambda\sum_{n\in\mathbb{Z}^d}\min(b_n,M)\,u_n^2+\lambda\sum_{n\in\mathbb{Z}^d}\underbrace{\max((b_n-M),0)}_{\geq0}u_n^2\\&\geq\sum_{n\in\mathbb{Z}^d}|\nabla u(n)|^2+\lambda\sum_{n\in\mathbb{Z}^d}\underbrace{\min(b_n,M)}_{:=\tilde{b}_n}u_n^2=:\tilde{h}^\lambda(u,u).\end{aligned}$$

Since $\left(\tilde{b}_n\right)_{n\in\mathbb{Z}^d}:=(\min(b_n,M))_{n\in\mathbb{Z}^d}$ is bounded, we have $\ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right)=D\left(\tilde{h}^\lambda\right)\supset D\left(h^\lambda\right)$ and then

$$s(\lambda)=\inf_{u\in D\left(h^\lambda\right),||u||=1}h^\lambda(u,u)\geq\inf_{u\in D\left(h^\lambda\right),||u||=1}\tilde{h}^\lambda(u,u)\geq\inf_{u\in D\left(\tilde{h}^\lambda\right),||u||=1}\tilde{h}^\lambda(u,u).$$

Let us show that the potential $\left(\tilde{b}_n\right)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$ on each cube C_N^k (it is sufficient according to the proof of the theorem in the bounded case).

Let $I_1^k := \left\{i \in C_N^k \text{ such that } b_i \leq M\right\}$ and $I_2^k := \left\{i \in C_N^k \text{ such that } b_i > M\right\}$. We have

$$\sum_{n\in C_N^k} \tilde{b}_n = \sum_{n\in I_1^k} \tilde{b}_n + \sum_{n\in I_2^k} \tilde{b}_n \geq \sum_{n\in I_1^k} b_n + \sum_{n\in I_2^k} M.$$

- If $\sharp I_2^k = 0$, then : $\displaystyle\sum_{n\in C_N^k} \tilde{b}_n = \sum_{n\in I_1^k} b_n = \sum_{n\in C_N^k} b_n \geq \delta$ because the potential $(b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$ by assumption.
- If $\sharp I_2^k \geq 1$, then : $\displaystyle\sum_{n\in C_N^k} \tilde{b}_n \geq -\sharp I_1^k ||b^-||_\infty + \sharp I_2^k M.$

  But the relation $\sharp I_1^k = N^d - \sharp I_2^k$ and the choice of M imply that

$$\begin{aligned}
\sum_{n\in C_N^k} \tilde{b}_n &\geq \left(\sharp I_2^k - N^d\right) ||b^-||_\infty + \sharp I_2^k \left[\left(N^d - 1\right) ||b^-||_\infty + \delta\right] \\
&\geq N^d ||b^-||_\infty \left(\sharp I_2^k - 1\right) + \sharp I_2^k \delta \\
&\geq \sharp I_2^k \delta \geq \delta.
\end{aligned}$$

Then $\left(\tilde{b}_n\right)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ satisfies the condition $(M_{\delta,N})$ and the result proved in the bounded case implies that there exists $\epsilon > 0$ such that for all $\lambda \in (0, \epsilon)$,

$$\inf_{u\in D\left(\tilde{h}^\lambda\right), ||u||=1} \tilde{h}^\lambda (u, u) > 0.$$

Now, the result follows from the relation

$$s(\lambda) = \inf_{\substack{||u||=1 \\ u\in D(h^\lambda)}} h^\lambda(u, u) \geq \inf_{\substack{||u||=1 \\ u\in D(\tilde{h}^\lambda)}} \tilde{h}^\lambda (u, u).$$

Necessity of the mean condition Let us assume that the potential b doesn't satisfy the mean condition $(M_{\delta,N})$. Then, for all $n \in \mathbb{N}$, for all $N \in \mathbb{N}$, there exists $k_{n,N} \in \mathbb{Z}^d$ such that $\displaystyle\sum_{i=k_N}^{k_N+N-1} b_i < \frac{1}{n}$. We have to show that $s(\lambda) \leq 0$, for all $\lambda \geq 0$. We fix $n = 1$ and we suppose : for all $N \in \mathbb{N}$, there exists $k_N \in \mathbb{Z}^d$ such that $\displaystyle\sum_{i=k_N}^{k_N+N-1} b_i < 1$. To prove the result, we construct a sequence $\left(u^N\right)_{N\in\mathbb{N}}$ in $D\left(h^\lambda\right)$ such that $h^\lambda\left(u^N, u^N\right) \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} 0$. For all $u \in D\left(h^\lambda\right)$, we have

$$h^\lambda (u, u) = \sum_{p\in\mathbb{Z}^d} \left(\sum_{i=1}^{d} |\nabla^i u(p)|^2\right) + \lambda b_p u_p^2.$$

Let N be fixed in $\mathbb{N}$ and $k_N := (k_{N,1}, \ldots, k_{N,d})$ be the associated point in $\mathbb{Z}^d$ such that $\sum_{i=k_N}^{k_N+N-1} b_i < 1$. Let $\mathbb{1}_N \in \ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right)$ defined by :

$$\mathbb{1}_N(p) = \begin{cases} 1 & \text{if } p \in [k_N, k_N + N - 1] = \prod_{i=1}^{d} [k_{N,i}, k_{N,i} + N - 1], \\ 0 & \text{otherwise.} \end{cases}$$

Since $supp(\mathbb{1}_N) = [k_N, k_N + N - 1]$ is compact, $\mathbb{1}_N \in D\left(h^\lambda\right)$ and we have

$$\begin{aligned} h^\lambda(\mathbb{1}_N, \mathbb{1}_N) &= \sum_{p=k_N-1}^{k_N+N-1} \left(\sum_{i=1}^{d} |\nabla^i \mathbb{1}_N(p)|^2 \right) + \lambda \sum_{p=k_N}^{k_N+N-1} b(p)\, \mathbb{1}_N(p)^2 \\ &= \sum_{i=1}^{d} \left(\sum_{p=k_N-1}^{k_N+N-1} |\nabla^i \mathbb{1}_N(p)|^2 \right) + \lambda \sum_{p=k_N}^{k_N+N-1} b(p)\, \mathbb{1}_N(p)^2 . \end{aligned}$$

For a fixed i in $[1, \ldots, d]$, we have

$$\begin{aligned} \sum_{p=k_N-1}^{k_N+N-1} |\nabla^i \mathbb{1}_N(p)|^2 &\leq \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{d} \sum_{p_j=k_{N,j}-1}^{k_{N,j}+N-1} \sum_{p_i=k_{N,i}-1}^{k_{N,i}+N-1} \left(\mathbb{1}_N(p_1, \ldots, p_{i-1}, p_i + 1, p_i + 1, \ldots, p_d) - \mathbb{1}_N(p)\right)^2, \\ &\leq \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{d} \sum_{p_j=k_{N,j}-1}^{k_{N,j}+N-1} 2 \leq 2(N+1)^{d-1} . \end{aligned}$$

Since this relation is true for all i in $[1, \ldots, d]$, we have

$$h^\lambda(\mathbb{1}_N, \mathbb{1}_N) \leq 2d(N+1)^{d-1} + \lambda \sum_{p=k_N}^{k_N+N-1} b(p) .$$

But we have choosen k_N such that $\sum_{i=k_N}^{k_N+N-1} b_i < 1$. Therefore, we have :

$$h^\lambda(\mathbb{1}_N, \mathbb{1}_N) \leq 2d(N+1)^{d-1} + \lambda.$$

Now we compute $||\mathbb{1}_N||^2 = \sum_{i=k_N}^{k_N+N-1} 1 = N^d$, and we finally find that

$$h^\lambda\left(\frac{\mathbb{1}_N}{||\mathbb{1}_N||}, \frac{\mathbb{1}_N}{||\mathbb{1}_N||}\right) \leq 2d\frac{(N+1)^{d-1}}{N^d} + \frac{\lambda}{N^d} \underset{N\to\infty}{\longrightarrow} 0.$$

This implies that

$$s(\lambda) := \inf_{\substack{u \in D(h^\lambda) \\ ||u||=1}} h^\lambda(u,u) \leq 0.$$

The result for non-negative potentials We now prove assertion 2. Since the potential b is non-negative, the spectral function $s(\lambda)$ is non-negative for all $\lambda \geq 0$. Moreover, $s(\lambda)$ is a concave function as the infimum of affine functions. Then, $s(\lambda)$ is an increasing non-negative function.

We assume that the potential b satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$. By the first point of Theorem 3.3.3, $s(\lambda) > 0$ for λ small enough. The growth of the spectral function $s(\lambda)$ implies then that $s(\lambda) > 0$ for all $\lambda > 0$.

We assume that the potential b doesn't satisfy the mean condition $(M_{\delta,N})$. Again, the first point of Theorem 3.3.3 implies that $s(\lambda) \leq 0$ for all $\lambda \geq 0$. Since $s(\lambda)$ is also non-negative, we then have $s(\lambda) = 0$ for all $\lambda \geq 0$. □

Remark 3.3.6. *1. This result does not hold in the continuous case for unbounded non-negative potentials in dimension $d \geq 2$ (see [AB1]). In fact, the argument of truncation of the potential used in the discrete case cannot be applied in the continuous case.*

2. If we choose $\gamma = \sqrt{\lambda}$ in the proof of Lemma 3.3.5, we find the following estimation. If the potential b satisfies the condition $(M_{\delta,N})$, we have for $\lambda > 0$ and small enough

$$\left\langle H^k_{N+1}(\lambda)\, x, x \right\rangle_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}} \geq \left(\lambda \frac{\delta}{(N+1)^d} - \lambda\sqrt{\lambda} \right) ||x||^2_{\mathbb{R}^{(N+1)^d}}.$$

We can deduce from this relation an upper bound for $s'(0)$, the derivative of the spectral function $s(\lambda)$ at 0 when the potential b satisfies the condition $(M_{\delta,N})$. Indeed, following the idea of the proof of Theorem 3.3.3, we have, for all $u \in \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ and for $\lambda > 0$ small enough

$$h^\lambda(u,u) \geq \left(\lambda \frac{\delta}{(N+1)^d} - \lambda\sqrt{\lambda} \right) ||u||^2_{\ell^2(\mathbb{Z}^d)}.$$

This implies that for $\lambda > 0$ small enough we have $\dfrac{s(\lambda)}{\lambda} \geq \dfrac{\delta}{(N+1)^d} - \sqrt{\lambda}$, and letting λ go to 0, we find that

$$s'(0) \geq \frac{\delta}{(N+1)^d}.$$

Application : Existence of a principal eigenvalue As in [AB1] and [Ou2] in the continuous case, we can deduce from Theorem 3.3.3 the existence of a principal eigenvalue.

Proposition 3.3.7. *Let $H(\lambda)$ be a discrete Schrödinger operator with a potential $(b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$: $b_n = b_n^+ - b_n^-$. We assume that :*

1. *$(b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ and $(b_n^+)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ satisfy the condition $(M_{\delta,N})$,*
2. *$b^- \not\equiv 0$ and $b_n^- \underset{|n|\to+\infty}{\longrightarrow} 0$.*

Then, there exists $\lambda_0 > 0$, there exists $u_0 \in \ell^2(\mathbb{Z}^d)$, $u_0 \neq 0$ such that $H(\lambda_0)u_0 = 0$.

Proof. Since $b^- \not\equiv 0$, $s(\lambda) \underset{\lambda\to+\infty}{\longrightarrow} -\infty$. Therefore, since $(b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ satisfies the condition $(M_{\delta,N})$, the first point of Theorem 3.3.3 assures that there exists $\lambda_0 > 0$ such that $s(\lambda_0) = 0$.

Since $(b_n^+)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ satisfies the condition $(M_{\delta,N})$, the second point of Theorem 3.3.3 assures that there exists $\epsilon > 0$ such that $s(-\Delta + \lambda_0 b^+) \geq \epsilon$.

We write $H(\lambda_0) = -\Delta + \lambda_0 b^+ - \lambda_0 b^-$. Since $b_n^- \underset{|n|\to+\infty}{\longrightarrow} 0$, the multiplication operator $u_n \to \lambda_0 b_n^- u_n$ is compact and we have, using Weyl's perturbation theorem :

$$\sigma_{ess}(H(\lambda_0)) = \sigma_{ess}\left(-\Delta + \lambda_0 b^+ - \lambda_0 b^-\right) = \sigma_{ess}\left(-\Delta + \lambda_0 b^+\right) \subseteq [\epsilon, +\infty).$$

The fact that $0 = s(\lambda_0) \in \sigma(H(\lambda_0)) \setminus \sigma_{ess}(H(\lambda_0))$ shows that 0 is an eigenvalue of $H(\lambda_0)$ and then there exists $u_0 \in \ell^2(\mathbb{Z}^d)$, $u_0 \neq 0$, such that $H(\lambda_0)u_0 = 0$. □

3.2 The top of the spectrum

In this section, we study the top of the spectrum of the discrete Schrödinger operator $H(\lambda)$: $M(\lambda) := \sup\sigma(H(\lambda))$. In fact, we can use the results found on the bottom of the spectrum to find similar ones on the top of the spectrum. This is due to the following property :

$$M(-\Delta + \lambda b) = -s(-\Delta - \lambda b) + 4d.$$

To prove it, we introduce $\tilde{H}(\lambda) = -\Delta - \lambda b$. We will use the unitary operator U defined on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ as follows : for all n in $\mathbb{Z}^d$, $(U\phi)(n) = (-1)^{|n|}\phi(n)$. It is easy to see that we have $UbU^{-1} = b$ and $U(-\Delta)U^{-1} = \Delta + 4d$. Then, we can write $UH(\lambda)U^{-1} = U(-\Delta)U^{-1} + \lambda UbU^{-1} = \Delta + 4d + \lambda b = -(-\Delta - \lambda b) + 4d$. That is $UH(\lambda)U^{-1} = -\tilde{H}(\lambda) + 4d$. And then, since U is unitary, we have $M(H(\lambda)) = M(UH(\lambda)U^{-1}) = -s\left(\tilde{H}(\lambda)\right) + 4d$.

We can now prove the following theorem as a consequence of Theorem 3.3.3.

Theorem 3.3.8. *Let $H(\lambda) = -\Delta + \lambda b$ be a discrete Schrödinger operator with a bounded potential $b = (b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ which may change sign : $b_n = b_n^+ - b_n^-$.*

1. *The following assertions are equivalent.*
   (1) *$M(\lambda) := M(-\Delta + \lambda b) < 4d$ for $\lambda \in (0, \epsilon)$ for some $\epsilon > 0$,*
   (2) *the potential $-b$ satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$.*

2. *In particular, if the potential $b_n = b_n^-$ is negative, the following assertions are equivalent.*
   (1) $M(\lambda) := M(-\Delta + \lambda b) < 4d$ *for all* $\lambda > 0$,
   (2) *the potential* $-b$ *satisfies the mean condition* $(M_{\delta,N})$.

Proof. We recall that $\tilde{H}(\lambda) = -\Delta - \lambda b$.

1. By Theorem 3.3.3, we know that $-b$ satisfies the condition $(M_{\delta,N})$ if and only if there exists $\epsilon > 0$ such that, for all $\lambda \in (0, \epsilon)$, $s\left(\tilde{H}(\lambda)\right) > 0$.

   Now, we use the equality $M(H(\lambda)) = -s\left(\tilde{H}(\lambda)\right) + 4d$ to conclude that $-b$ satisfies the condition $(M_{\delta,N})$ if and only if there exists $\epsilon > 0$ such that, for all $\lambda \in (0, \epsilon)$, $M(H(\lambda)) < 4d$.
2. The proof is similar.

□

We have mentioned in the introduction that a consequence of this theorem is that under the condition $(M_{\delta,N})$, the operator $H(\lambda)$ has spectrum over $4d$. Moreover, using the unitary operator U, a similar result can be deduced for the bottom of the spectrum.

Theorem 3.3.9. *Let $H(\lambda) = -\Delta + \lambda b$ be a discrete Schrödinger operator with a bounded potential $b = (b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ which may change sign : $b_n = b_n^+ - b_n^-$.*

1. *If the potential b satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$, then $M(\lambda) \geq 4d + \lambda\frac{\delta}{N^d} > 4d$, for all $\lambda > 0$.*
2. *If the potential $-b$ satisfies the mean condition $(M_{\delta,N})$, then $s(\lambda) \leq -\lambda\frac{\delta}{N^d} < 0$, for all $\lambda > 0$.*

Proof.
1. For $\epsilon > 0$ to be choosen, we define $H_\epsilon(\lambda) := H(\lambda) - \lambda\epsilon = -\Delta + \lambda(b - \epsilon)$ so that $H(\lambda) = H_\epsilon(\lambda) + \lambda\epsilon$. Let $\omega > 0$. Since b satisfies the condition $(M_{\delta,N})$, we have, for all $k \in \mathbb{Z}^d$, $\sum\limits_{i=k}^{k+N-1}(b_i - \epsilon) \geq \delta - N^d\epsilon = \omega$, for $\epsilon_\omega = \frac{\delta-\omega}{N^d}$. We fix such an ϵ_ω. This shows that the potential $(b - \epsilon_\omega)$ satisfies the condition $(M_{\omega,N})$ and as a consequence, the potential $-(b - \epsilon_\omega)$ doesn't satisfy the condition $(M_{\omega,N})$ (see Remark 3.3.2). According to Theorem 3.3.8, we have $M(H_{\epsilon_\omega}(\lambda)) \geq 4d$ for all $\lambda > 0$. By construction of $H_\epsilon(\lambda)$, we then have, for all $\lambda > 0$

$$M(\lambda) = M(H_{\epsilon_\omega}(\lambda)) + \lambda\epsilon_\omega \geq 4d + \lambda\epsilon_\omega = 4d + \lambda\frac{\delta - \omega}{N^d}.$$

   Since this relation is true for all $\omega > 0$, we finally find that $M(\lambda) \geq 4d + \lambda\frac{\delta}{N^d}$.
2. This is a consequence of the first point of Theorem 3.3.9 and the equality $M\left(\tilde{H}(\lambda)\right) = -s(H(\lambda)) + 4d$.

□

3.3 The spectral functions

In this section, we describe the behaviour of the spectral functions $s(\lambda) := s(-\Delta + \lambda b)$ and $M(\lambda) := M(-\Delta + \lambda b)$. We start with the following usefull and well known facts.

1. $s(0) = 0$ and $M(0) = 4d$.
2. $s(\lambda)$ is a concave function as the infimum of affine functions and $M(\lambda)$ is a convex function as the supremum of affine functions.
3. If $b^+ \not\equiv 0$, then $M(\lambda) \underset{\lambda\to+\infty}{\longrightarrow} +\infty$ and if $b^- \not\equiv 0$, then $s(\lambda) \underset{\lambda\to+\infty}{\longrightarrow} -\infty$. Indeed, if for example $b^+(n_0) > 0$ then $M(\lambda) = \sup\limits_{u,||u||=1} \langle(-\Delta + \lambda b)\, u, u\rangle \geq \langle(-\Delta + \lambda b)\, e_{n_0}, e_{n_0}\rangle \geq \lambda \langle b e_{n_0}, e_{n_0}\rangle = \lambda b^+(n_0) \underset{\lambda\to+\infty}{\longrightarrow} +\infty$. Similarly for $s(\lambda)$.

When the potential b is non-negative, $M(\lambda)$ and $s(\lambda)$ are increasing functions. Indeed, in that case, we have $M(0) = 4d$ and $M(\lambda) \geq 4d$ for all $\lambda \geq 0$ and $s(0) = 0$ and $s(\lambda) \geq 0$ for all $\lambda \geq 0$. Then by convexity, they are increasing functions. Figure 3.2 illustrates Theorems 3.3.3 and 3.3.9.

$b \geq 0$ satisfies $(M_{\delta,N})$	$b \geq 0$ doesn't satisfy $(M_{\delta,N})$

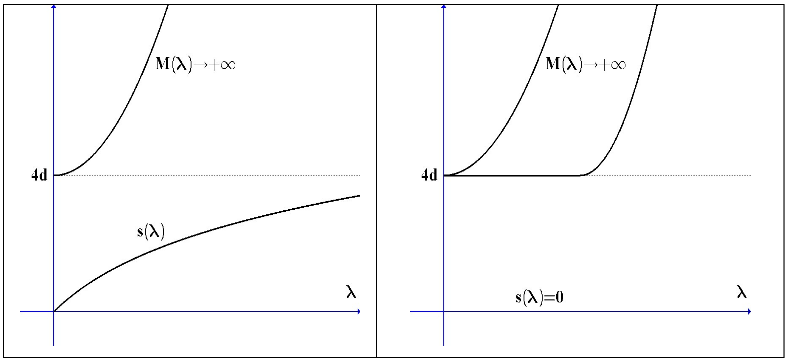


FIGURE 3.2 – The spectral functions for non-negative potentials.

When b may change sign, the situation is more complex and we have to estimate the weight of b^+ and b^-. Figure 3.3 below illustrates Theorems 3.3.3, 3.3.8 and 3.3.9.

As a consequence of that study, we can deduce the following property about the spectral functions.

Corollary 3.3.10. *Let $H(\lambda) = -\Delta + \lambda b$ be a discrete Schrödinger operator with a bounded potential $b = (b_n)_{n\in\mathbb{Z}^d}$ which may change sign : $b_n = b_n^+ - b_n^-$ and a non-negative coupling constant λ. We have*

$$M(\lambda) - s(\lambda) \geq 4d \text{ for all } \lambda \geq 0.$$

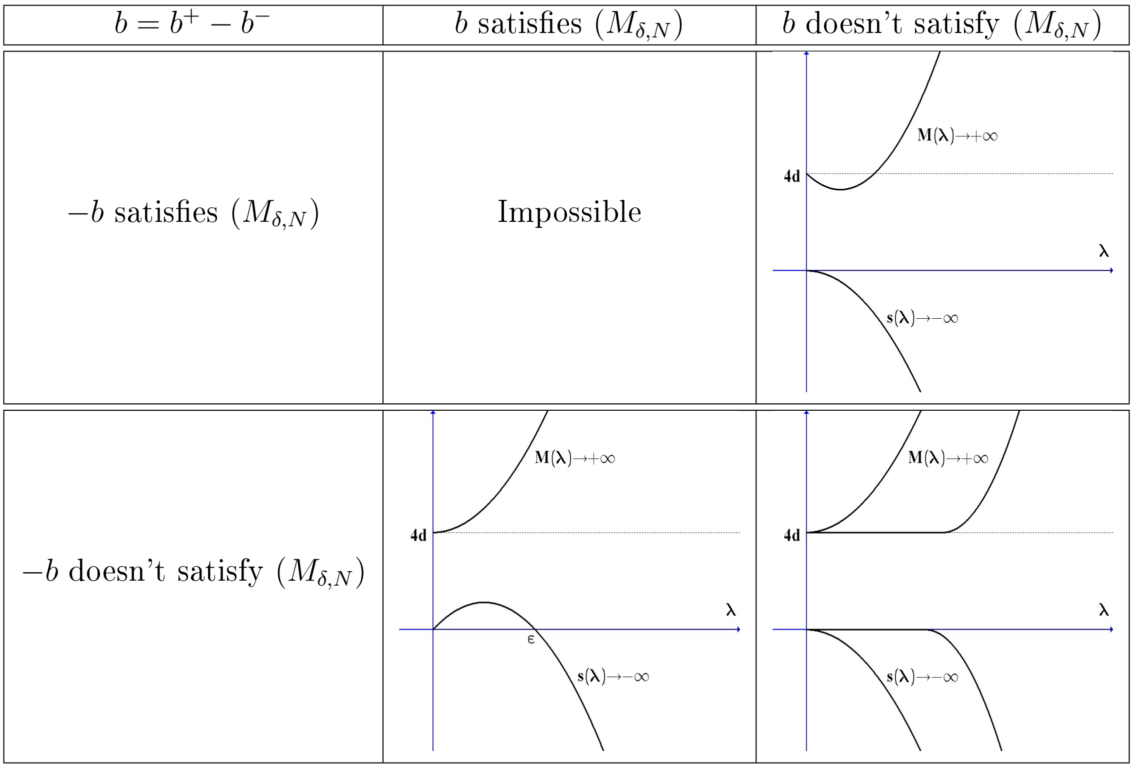


FIGURE 3.3 – The spectral functions for potentials which change sign.

Proof. of Corollary 3.3.10.

It is sufficient to consider potentials b such that b satisfies the condition $(M_{\delta,N})$ and $-b$ doesn't satisfy the condition $(M_{\delta,N})$. Indeed, on the one hand, the result is immediate for potentials where both b and $-b$ don't satisfy the condition $(M_{\delta,N})$ (see Figure 3.3). On the other hand, using the operator U, we can deduce the result for potentials b such that b doesn't satisfy the condition $(M_{\delta,N})$ and $-b$ satisfies the condition $(M_{\delta,N})$. Then, we assume that b satisfies the condition $(M_{\delta,N})$.

Let us consider the set $\mathcal{M} = \left\{(\delta, N) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{N} \text{ such that } b \text{ satisfies } (M_{\delta,N})\right\}$ and the set $\mathcal{E} = \left\{\frac{\delta}{N^d}, (\delta, N) \in \mathcal{M}\right\}$. By assumption, b satisfies the condition $(M_{\delta,N})$ for some $\delta > 0$ and $N \in \mathbb{N}$ and then $\mathcal{E} \neq \emptyset$. Moreover, if $(\delta, N) \in M$, we have $\delta < \sum_{i=k}^{k+N-1} b_i \leq N^d ||b||_\infty$ and then $\mathcal{E}$ is bounded. Hence, $\sup \mathcal{E}$ exists and we note $\mu_{\mathcal{E}} := \sup \mathcal{E} < +\infty$.

By Theorem 3.3.9, for all $\frac{\delta}{N^d} \in \mathcal{E}$, we have $M(\lambda) \geq 4d + \lambda \frac{\delta}{N^d}$, for all $\lambda \geq 0$. Thus, we also have $M(\lambda) \geq 4d + \lambda \mu_{\mathcal{E}}$, for all $\lambda \geq 0$. To prove our statement, we need to show that $s(\lambda) \leq \lambda \mu_{\mathcal{E}}$, for all $\lambda \geq 0$. To this aim, we introduce the operator $H_{\mu_{\mathcal{E}}}(\lambda) := H(\lambda) - \lambda \mu_{\mathcal{E}} = -\Delta + \lambda (b - \mu_{\mathcal{E}})$. Let us show that $H_{\mu_{\mathcal{E}}}$ doesn't satisfy the condition $(M_{\eta,M})$ for any $\eta > 0$ and $M \in \mathbb{N}$. If it does for some $\eta > 0$ and $M \in \mathbb{N}$, we can write for all $k \in \mathbb{Z}^d$, $\sum_{i=k}^{k+M-1} b_i - \mu_{\mathcal{E}} > \eta$, that is $\sum_{i=k}^{k+M-1} b_i > \eta + M^d \mu_{\mathcal{E}}$. But this means that the potential b satisfies the condition $\left(M_{\eta+M^d\mu_{\mathcal{E}},M}\right)$. Now, by definition of $\mu_{\mathcal{E}}$, we have $\frac{\eta+M^d\mu_{\mathcal{E}}}{M^d} \leq \mu_{\mathcal{E}}$ which implies that $\eta \leq 0$ and gives a contradiction. Hence, $H_{\mu_{\mathcal{E}}}$ doesn't satisfy the condition $(M_{\eta,M})$ for any $\eta > 0$ and $M \in \mathbb{N}$. Now we can apply Theorem 3.3.3 to $H_{\mu_{\mathcal{E}}}$ and conclude that $s\left(H_{\mu_{\mathcal{E}}}(\lambda)\right) \leq 0$, for all $\lambda \geq 0$. Finally, $s(\lambda) = s\left(H_{\mu_{\mathcal{E}}}(\lambda)\right) + \lambda\mu_{\mathcal{E}} \leq \lambda\mu_{\mathcal{E}}$, for all $\lambda \geq 0$ and then

$$M(\lambda) - s(\lambda) \geq 4d, \text{ for all } \lambda \geq 0.$$

□

Remark 3.3.11. *We can give some estimates of the values of $M'(0)$ and $s'(0)$ when the potential b satisfies the condition $(M_{\delta,N})$. Indeed, according to the proof of Corollary 3.3.10, we have for all $\lambda \geq 0$*

$$M(\lambda) \geq 4d + \lambda \sup_{(\delta,N)\in\mathcal{M}} \frac{\delta}{N^d} \text{ and } s(\lambda) \leq \lambda \sup_{(\delta,N)\in\mathcal{M}} \frac{\delta}{N^d},$$

where $\mathcal{M} = \left\{(\delta, N) \in \mathbb{R}_+^* \times \mathbb{N} \text{ such that } b \text{ satisfies } (M_{\delta,N})\right\}$. Using Remark 3.3.6, we obtain

$$M'(0) \geq \sup_{(\delta,N)\in\mathcal{M}} \frac{\delta}{N^d} \quad \text{and} \quad \sup_{(\delta,N)\in\mathcal{M}} \frac{\delta}{(N+1)^d} \leq s'(0) \leq \sup_{(\delta,N)\in\mathcal{M}} \frac{\delta}{N^d}.$$

In the next section, we will see that some of the situations described in figures 3.2 and 3.3 cannot happened in dimension one or two.

4 The special case of dimensions one and two

In all this section, the bilinear form h is the one introduced in Section 2 to defined $H(\lambda)$ for unbounded potentials : $h = h^\lambda$ with $\lambda = 1$: for $u, v \in D(h)$, we have

$$h(u,v) = \sum_{i=1}^{d} \left\langle \nabla^i u, \nabla^i v \right\rangle + \langle bu, v \rangle .$$

The absence of bound states In this section, we will give a proof to Theorem 3.1.3 stated in the introduction. This theorem was first proven in dimension one by R. Killip and B. Simon in [KS] and then extended in dimension two in [DHKS]. We will actually prove the following equivalent theorem :

Theorem 3.4.1. *For $d = 1$ or $d = 2$, we suppose that $b \not\equiv 0$. If $s(H) \geq 0$, then $M(H) > 4d$.*

Our proof is quite different from the one in [DHKS], but as in there, the key of the dimension dependance is the existence of sequences $\phi_p \in \ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right)$ such that $\phi_p(n) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 1$ for all $n \in \mathbb{Z}^d$ and $\langle -\Delta\phi_p, \phi_p\rangle \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0$. In dimensions one and two, one can provide explicit sequences with those properties (see Proposition 3.4.2). It is not possible in dimension higher than three (see [DHKS]). One can find the proof of Proposition 3.4.2 in [DHKS] (Proposition 4.3 and 4.4).

Proposition 3.4.2. *For $d = 1$ or $d = 2$, there exists sequences $\phi_p \in \ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right)$ which satisfy*

1. $\phi_p(n) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 1$, *for all* $n \in \mathbb{Z}^d$,
2. $\langle -\Delta\phi_p, \phi_p\rangle = \sum_{n\in\mathbb{Z}} |\nabla\phi_p(n)|^2 \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0$,
3. $\phi_p \in D(h)$, *for all* $p \geq 1$.

   For $d = 1$, for all $p \geq 1$ and $n \in \mathbb{Z}$, $\phi_p(n) = \begin{cases} 1 - \frac{|n|}{p} & \text{if } |n| \leq p, \\ 0 & \text{if } |n| \geq p. \end{cases}$

   For $d = 2$, for all $p \geq 1$ and $n \in \mathbb{Z}^2$,

$$\phi_p(n_1, n_2) = \begin{cases} 1 - \frac{\ln(1+|n_1|+|n_2|)}{\ln(p+1)} & \text{if } |n_1| + |n_2| \leq p, \\ 0 & \text{if } |n_1| + |n_2| \geq p. \end{cases}$$

Proposition 3.4.3 shows how we can use these sequences to find spectrum outside $[0, 4d]$, for $d = 1$ or $d = 2$. It is inspired from [KS] (Proposition 10.10).

Proposition 3.4.3. *For $d = 1, 2$, let $\phi_p \in \ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right)$ be such that $\langle -\Delta\phi_p, \phi_p\rangle \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0$ (this is possible according to Proposition 3.4.2). Let $A(\phi_p) := \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} b(n)\,\phi_p(n)^2$.*

1. *If $\liminf_{p\to+\infty} A(\phi_p) < 0$, then H has spectrum in $(-\infty, 0)$.*
2. *If $\limsup_{p\to+\infty} A(\phi_p) > 0$, then H has spectrum in $(4d, +\infty)$.*

Proof. 1. By Proposition 3.4.2, $\phi_p \in D(h)$. Moreover, we have

$$h(\phi_p, \phi_p) = \langle -\Delta\phi_p, \phi_p\rangle + \langle b\phi_p, \phi_p\rangle = \langle -\Delta\phi_p, \phi_p\rangle + A(\phi_p).$$

The assumption $\liminf_{p\to+\infty} A(\phi_p) < 0$ implies that there exist $\epsilon > 0$ and $p_0 > 0$ such that for all $p \geq p_0$, $A(\phi_p) \leq -\epsilon$.
Since $\langle -\Delta\phi_p, \phi_p\rangle \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0$, there exists $p_1 > 0$ such that $\langle -\Delta\phi_p, \phi_p\rangle \leq \frac{\epsilon}{2}$ for all $p \geq p_1$.
Let $q = \max(p_0, p_1)$. We have $\frac{\langle H\phi_q, \phi_q\rangle}{||\phi_q||^2} \leq \frac{\epsilon}{2||\phi_q||^2} - \frac{\epsilon}{||\phi_q||^2} = -\frac{\epsilon}{2||\phi_q||^2} < 0$.
We conclude using the min-max principle which assures that H has spectrum in $(-\infty, 0)$.

2. We use the unitary operator U on $\ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right)$ given by : $(U\phi)(n) = (-1)^{|n|}\phi(n)$. Since $\phi_p \in D(h)$, $U\phi_p \in D(h)$ too and we can compute

$$h\left(U\phi_p, U\phi_p\right) = \langle -\Delta U\phi_p, U\phi_p\rangle + A\left(U\phi_p\right) = \left\langle U(-\Delta)U^{-1}\phi_p, \phi_p\right\rangle + A\left(U\phi_p\right).$$

But we have $UbU^{-1} = b$ and $U(-\Delta)U^{-1} = 4d - (-\Delta)$. Therefore, we have $A\left(U\phi_p\right) = \langle bU\phi_p, U\phi_p\rangle = \langle UbU\phi_p, \phi_p\rangle = \langle b\phi_p, \phi_p\rangle = A\left(\phi_p\right)$ and then

$$h\left(U\phi_p, U\phi_p\right) = 4d||\phi_p||^2 - \langle -\Delta\phi_p, \phi_p\rangle + A\left(\phi_p\right).$$

Now, the same reasonment as above shows that H has spectrum in $(4d, +\infty)$ if $\limsup_{p\to+\infty} A\left(\phi_p\right) > 0$.

□

We can now give the proof of Theorem 3.4.1 which is inspired from [Ou1].

Proof. of Theorem 3.4.1.

For $d = 1, 2$, let $\phi_p \in \ell^2\left(\mathbb{Z}^d\right)$ be the corresponding sequence from Proposition 3.4.2.

The assumption $s(H) \geq 0$ means that H has no spectrum in $(-\infty, 0)$. Then, the first point of Proposition 3.4.3 assures that $\liminf_{p\to+\infty} A\left(\phi_p\right) \geq 0$ which implies that $\limsup_{p\to+\infty} A\left(\phi_p\right) \geq 0$.

1. If $\limsup_{p\to+\infty} A\left(\phi_p\right) > 0$, we use the second point of proposition 3.4.3 and we conclude that H has spectrum in $(4d, +\infty)$ and then $M(H) > 4d$.
2. If $\limsup_{p\to+\infty} A\left(\phi_p\right) = 0$, then $\liminf_{p\to+\infty} A\left(\phi_p\right) = 0$ and $\lim_{p\to+\infty} A\left(\phi_p\right)$ exists and is equal to zero. We will now prove that this situation can never happend.

Let us then suppose that $\lim_{p\to+\infty} A\left(\phi_p\right) = 0$, that is $\sum_{n\in\mathbb{Z}^d} b(n)\,\phi_p(n)^2 \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0$. Moreover, by Proposition 3.4.2, we know that $\phi_p \in D(h)$ and $\sum_{n\in\mathbb{Z}^d} |\nabla\phi_p(n)|^2 \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0$. We then have $h\left(\phi_p, \phi_p\right) = \displaystyle\sum_{n\in\mathbb{Z}^d} |\nabla\phi_p(n)|^2 + \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} b(n)\,\phi_p(n)^2 \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0$.

Now, the fact that $s(h) = s(H) = 0$ assure that the bilinear form h is positive so we can apply the Cauchy-Schwarz inequality to h : for all $v \in D(h)$,

$|h\left(\phi_p, v\right)|^2 \leq h\left(\phi_p, \phi_p\right) h(v, v) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0$. In particular, we have

$$h\left(\phi_p, v\right) = \sum_{i=1}^{d}\sum_{n\in\mathbb{Z}^d} \nabla^i\phi_p(n)\,\nabla^i v(n) + \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} b(n)\,\phi_p(n)\,v(n) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0.$$

But, using Cauchy-Schwarz inequality again for $i = 1, 2$, we find that

$$|\sum_{n\in\mathbb{Z}^d} \nabla^i\phi_p(n)\,\nabla^i v(n)|^2 \leq \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} |\nabla^i\phi_p(n)|^2 \sum_{n\in\mathbb{Z}^d} |\nabla^i v(n)|^2 \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0.$$

Therefore, for all $v \in D(h)$, we have $\sum_{n\in\mathbb{Z}^d} b(n)\,\phi_p(n)\,v(n) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0$.

Now we choose $v = e_j$, with $j \in \mathbb{Z}^d$, defined by $e_j(n) = \delta_{j,n}$, for all $n \in \mathbb{Z}^d$. We have $e_j \in D(h)$ and $\sum_{n\in\mathbb{Z}^d} b(n)\,\phi_p(n)\,e_j(n) = b(j)\,\phi_p(j) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0$. But Proposition 3.4.2 assures that $\phi_p(j) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 1$ and then $b(j) = 0$ for all $j \in \mathbb{Z}^d$. Then, we find that $b \equiv 0$, in contradiction with the hypothesis. $\square$

With the help of Theorem 3.4.1, we can improve the results obtained in Section 3.3. Indeed, in dimension one or two, we cannot have simultaneously $s(\lambda) = 0$ and $M(\lambda) = 4d$. Therefore, if we refer to figures 3.2 and 3.3, some situations described there cannot happend. We summarize the results in Figure 3.4 and Figure 3.5.

$b \geq 0$ satisfies $(M_{\delta,N})$	$b \geq 0$ doesn't satisfy $(M_{\delta,N})$

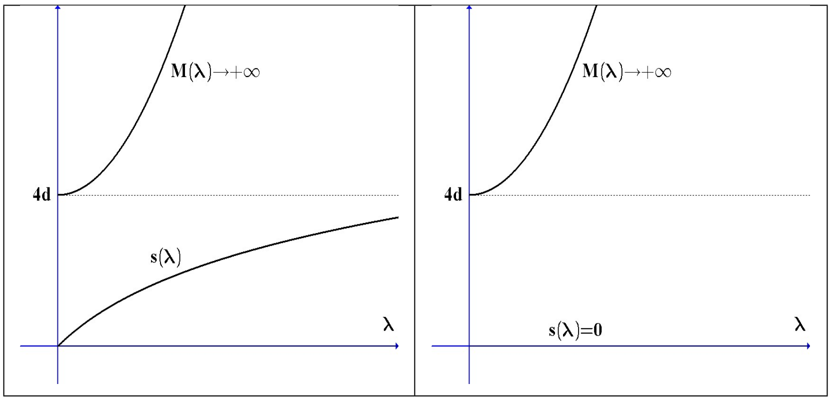
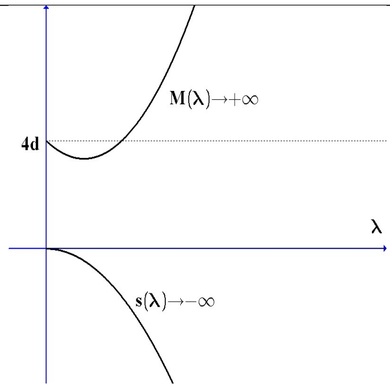
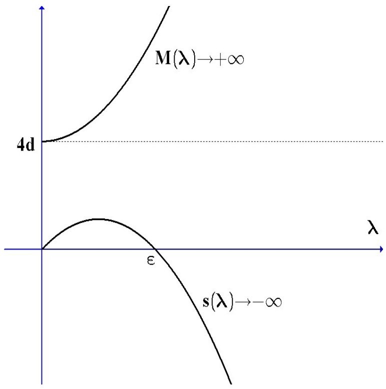
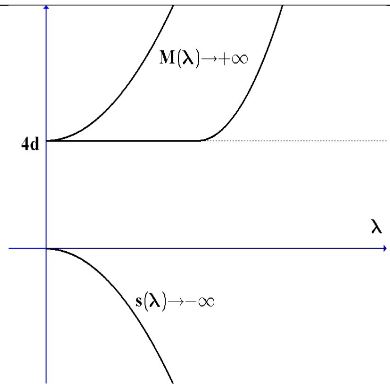


FIGURE 3.4 – The spectral functions for non-negative potentials (d=1,2).

<table>
<tr><th>$b = b^+ - b^-$</th><th>b satisfies $(M_{\delta,N})$</th><th>b doesn't satisfy $(M_{\delta,N})$</th></tr>
<tr><td>$-b$ satisfies $(M_{\delta,N})$</td><td>Impossible</td><td>
</td></tr>
<tr><td>$-b$ doesn't satisfy $(M_{\delta,N})$</td><td>
</td><td>

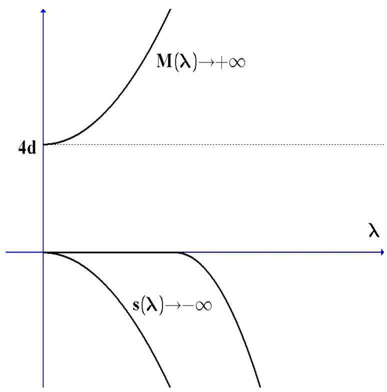
or

</td></tr>
</table>

FIGURE 3.5 – The spectral functions for potentials which change sign (d=1,2).

Chapitre 4

Propriétés spectrales des opérateurs de Schrödinger combinatoires sur des graphes pondérés

Ce chapitre qui s'intéresse aux opérateurs de Schrödinger sur des graphes infinis comporte deux parties indépendantes. La première est une généralisation de l'étude faite au chapitre 3 sur les opérateurs de Schrödinger sur $\mathbb{Z}^d$ au cas des graphes pondérés infinis. Dans ce cadre plus général, les résultats obtenus sur les fonctions spectrales sont moins précis mais permettent tout de même une bonne compréhension du problème. Cette étude doit être rapprochée des résultats obtenus dans le cas continu des variétés Riemanniennes par [Ou1].

Dans la seconde partie, les outils spécifiques aux graphes permettent d'étudier plus naturellement le comportement asymptotique du bas du spectre des opérateurs de Schrödinger que dans le cas de $\mathbb{Z}^d$. Nous montrons ainsi une version discrète des résultats obtenus par [AB2] dans le cas continu pour les opérateurs de Schrödinger sur $\mathbb{R}^d$.

Nous invitons le lecteur non familier de l'analyse sur les graphes à lire le chapitre 2. On y trouvera les définitions et notions de base nécessaire à la compréhension de nos travaux ainsi que la démonstration de certains résultats importants pour notre étude et énoncés ici sans preuve.

Abstract

Let $H(\lambda) = -\Delta + \lambda b$ be the combinatorial Schrödinger operator on an infinite connected graph G with a potential b and a non-negative coupling constant λ. When $b \equiv 0$, it is well known that $\sigma(-\Delta) \subset [0,2]$. When $b \not\equiv 0$, let $s(-\Delta + \lambda b) := \inf \sigma(-\Delta + \lambda b)$ and $M(-\Delta + \lambda b) := \sup \sigma(-\Delta + \lambda b)$ be the bounds of the spectrum of the Schrödinger operator.

One of the aims of this paper is to study the influence of the potential b on the bounds of the spectrum of $-\Delta$. More precisely, we give a condition on the potential b such that $s(-\Delta + \lambda b)$ is strictly positive for λ small enough. We obtain a similar result for the top of the spectrum. We also prove that for a recurent bipartite weighted graph, the only Schrödinger operator $H = -\Delta + b$ such that $\sigma(H) \subset [0,2]$ is the Laplacian $-\Delta$.

We study independently the asymptotic behaviour of the function $\lambda \mapsto s(-\Delta + \lambda b)$ for non-negative potentials b. We prove that $s(\infty) := \lim_{\lambda \to +\infty} s(-\Delta + \lambda b) < +\infty$ if and only if $\inf_{x \in V} b(x) = 0$ and we characterize this limit in the general case. As an application, we give an exact value of this limit for certain Jacobi matrices.

Keywords : Schrödinger operators, Spectrum, Bounds, Spectral functions, Weighted graphs.

1 Introduction

Spectral analysis and potential theory on infinite graphs have been a subject of interest for the last decades ([BCG], [Ch], [CG], [Del1], [DK], [DK2], [GT], [Wo]). These works are often linked with similar results on Riemannian manifolds in the continuous setting. In this paper, we study some spectral properties of the combinatorial Schrödinger operator on an infinite graph. This work generalizes [Ak] where the discrete Schrödinger operator on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ was considered. It is also motivated by similar results on complete Riemannian manifolds obtained by E.M Ouhabaz [Ou1] since these two objects (graphs and Riemannian manifolds) are strongly connected.

Let $G = (V, E)$ be a countably infinite connected graph where V is the set of infinite number of vertices and E the set of edges connecting two vertices. If the vertices $x, y \in V$ are connected by an edge e, we write $x \sim y$ and $e = (x, y)$. We suppose that the graph is simple, that is, it contains no loops ($e = (x, x)$) nor multiple edges. Suppose that each edge (x, y) is assigned a positive symmetric weight $\mu_{xy} = \mu_{yx}$. We can then define a weight μ on vertices by $\mu(x) = \sum_{y \in V, y \sim x} \mu_{xy}$ and (G, μ) is then called a weighted graph. For the standard weight $\mu_{xy} = 1$ for all edge (x, y), $\mu(x)$ is the degree $d(x)$ of the vertex x which represents the number of adjacent vertices of x. The combinatorial Laplacian $-\Delta$ acts on functions $f : V \longrightarrow \mathbb{R}$ as follows.

$$-\Delta f(x) = f(x) - \frac{1}{\mu(x)} \sum_{y\sim x} f(y)\mu_{xy} = \frac{1}{\mu(x)} \sum_{y\sim x} (f(x) - f(y))\mu_{xy}.$$

It is easy to check that $-\Delta$ is a bounded self-adjoint operator on $\ell^2(V,\mu)$ and that $\sigma(-\Delta) \subset [0,2]$ (see the next section). For any real-valued bounded potential $b : V \longrightarrow \mathbb{R}$ and any non-negative coupling constant λ, the Schrödinger operator $H(\lambda) := -\Delta + \lambda b$ is also bounded and self-adjoint on $\ell^2(V,\mu)$. We note $s(\lambda) := s(-\Delta+\lambda b) := \inf \sigma(-\Delta+\lambda b)$ the bottom of its spectrum. We investigate the following two questions.

- Question 1 : For which class of potentials b and for which values of λ do we have $s(\lambda) > 0$?
- Question 2 : What is the behavior of $s(\lambda)$ when λ goes to infinity ?

Concerning question 1, the strict positivity of $s(\lambda)$ assures an exponential decay in time of the solution to the heat equation. This question has first been studied in the euclidian case by W. Arendt and C. Batty in [AB1] on $\mathbb{R}^d$. For a bounded non-negative potential B with compact support, it is easy to see from the variational formula $s(-\Delta + B) = \inf_{u\in D(-\Delta+B), ||u||=1} \int_{\mathbb{R}^d} |\nabla u|^2 + \int_{\mathbb{R}^d} Bu^2$ that $s(-\Delta + B) = 0$. To assure the strict positivity of the spectral bound of the Schrödinger operator, the potential must have a contribution in all the space in some sense. Indeed, it is proved in [AB1] that $s(-\Delta + B) > 0$ holds if and only if the potential B satisfies the following mean condition $(M(R))$ for some $R > 0$.

$$\inf_{y\in\mathbb{R}^d} \int_{B(y,R)} B(x)dx > 0. \tag{$M(R)$}$$

In the Riemannian manifolds setting, this question has been studied in [Ou1]. Assuming a local doubling property and some L^2-Poincaré inequalities on the manifold M, the author extends the result to bounded potentials $B = B^+ - B^-$. However, in this setting, one has to take consideration on the volume of the balls and the mean condition becomes the following.

$$\inf_{y\in M} \frac{1}{|B(y,R)|} \int_{B(y,R)} B(x)dx > 0. \tag{$M^*(R)$}$$

Assuming that the negative part of the potential vanishes at infinity, it is proved that the spectral bound $s(\lambda)$ is strictly positive for $\lambda > 0$ and small enough if and only if the positive part of the potential V^+ satisfies the mean condition $(M^*(R))$. Note that a similar result is proved in [Sh].

One of the aims of this paper is to prove the graph version of the result stated above in the Riemannian manifold case. Our general setting will be the following. We will assume that the graph G has uniformly bounded degree, that is $\sup_{x\in V} d(x) < +\infty$

where the degree $d(x)$ of a vertex x denote the number of adjacent vertices. This assumption replaces the volume doubling assumption in the Riemannian manifold setting. Note that if one defines the volume with the counting measure, the fact that the graph G has uniformly bounded degree is implied by the volume doubling condition (see [Del2]). Moreover, we will assume that the graph G satisfies the following Poincaré inequality $(PI(R))$. For some $R > 0$, there exist $C(R) > 0$, such that for all $x \in V$ and for any function f on V,

$$\sum_{y \in B(x,R)} |f(y) - f_{B(x,R)}|^2 \mu_B(y) \leq C(R) \sum_{x,y \in B(x,R), x \sim y} (f(x) - f(y))^2 \mu_{xy}, \qquad (PI(R))$$

where $B = B(x,R)$ denotes the ball of radius R centered in x, $\mu_B(y) := \sum_{z \in B(x,R), z \sim y} \mu_{yz}$ is the weight of y in $B(x,R)$, and $f_{B(x,R)}$ is the average of f on the ball $B(x,R)$. When the weights μ_{xy} are uniformly bounded : $c \leq \mu_{xy} \leq C$ for all $x \sim y \in V$ (this is the case for the standard weight), we can easily obtain such Poincaré inequality from a lower bound on the first non-zero eigenvalue of the Laplacian on the ball $B(x,R)$. See Section 2 for details. As in the continuous case, we introduce the following mean condition $(M_{\delta,R})$ for some $\delta > 0$ and $R > 0$.

$$\frac{1}{|B(x,R)|} \sum_{y \in B(x,R)} b(y) \mu_B(y) \geq \delta \text{ for all } x \in V, \qquad (M_{\delta,R})$$

where $|B(x,R)| := \sum_{y \in B(x,R)} \mu_B(y)$ denotes the volume of the ball $B(x,R)$. We prove the following

Theorem 4.1.1. *Let b be a non-negative bounded potential. If b satisfies the mean condition $(M_{\delta,R})$, then $s(\lambda) > 0$ for all $\lambda > 0$.*

Let $b = b^+ - b^-$ be a bounded potential such that b^- vanishes at infinity. If b^+ satisfies the mean condition $(M_{\delta,R})$, then $s(\lambda) > 0$ for $\lambda > 0$ small enough.

We also prove that the converse holds assuming a growth condition on the graph. The proof of this result uses similar ideas as in [Ou1] and [Ak]. The idea is to cover the space with adapted balls and to study the "restrictions" of the operator on these balls. The assumption on the uniform boundedness of the degrees allows us to control the number of balls which cover each vertex. Moreover, using the Poincaré inequality, we show the restriction of the operator on each ball has a spectral bound uniformly bounded from below. This uniformity and the good recovering of the space provide the strict positivity of the spectral bound of the operator on the whole space.

Note that the results proven in [Ak] for the discrete Schrödinger operator on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ are stronger because $\mathbb{Z}^d$ is a nice graph with good covering properties. In particular, Theorem 4.1.1 remains valid for unbounded potentials with a bounded negative part.

For bipartite graphs, we study the top of the spectrum $M(\lambda) := \sup \sigma(-\Delta + \lambda b)$. Indeed, it turns out that in that case the bottom and the top of the spectrum are strongly related. Indeed, using the unitary transform $U\phi(x) = (-1)^{|x|}\phi(x)$, where $|x|$ is the distance from a fixed point x_0, we can deduce from the study of $s(\lambda)$ informations on the behavior of $M(\lambda)$. As a consequence, we obtain the following result for recurrent bipartite graphs.

Theorem 4.1.2. *Let (G, μ) be a bipartite weighted graph. We assume that G is recurrent. Let $H = -\Delta + b$ be a Schrödinger operator on G.*

If $\sigma(H) \subset [0, 2]$ then $b \equiv 0$.

This result is due to Damanik et al. in [DHKS] in the particular case of the discrete Schrödinger operator on $\ell^2(\mathbb{Z}^d)$ for $d = 1$ or $d = 2$. They also provide a counter-example for higher dimensions ($d \geq 3$). Theorem 4.1.2 generalizes this result since it is well-known that the graph $\mathbb{Z}^d$ is recurrent if and only if $d \leq 2$ (see [Wo]).

Concerning question 2, the study in the Euclidian case has been made in [AB2]. Note that the answer is obvious if the potential has non trivial negative part. Indeed, it is easy to see from the min-max principle that $s(\lambda)$ goes to $-\infty$ when λ goes to $+\infty$. Then, we focus on non-negative potentials. In that case, $s(\lambda)$ is a concave increasing function and then its limit $s(\infty) := \lim\limits_{\lambda \to +\infty} s(\lambda)$ exists in $\mathbb{R}^+ \cup \{+\infty\}$. We show that $s(\infty)$ is finite if and only if the potential b satisfies $\inf\limits_{x \in V} b(x) = 0$. If there exists a non empty set Ω such that $b \equiv 0$ on Ω and $b \geq \beta > 0$ on the complement of Ω, we show that $s(\infty)$ is the smallest eigenvalue of the Laplacian with Dirichlet Boundary condition on Ω. It is then easy to extend this result to any potential which satisfies $\inf\limits_{x \in V} b(x) = 0$. As an application, we give the exact value of $s(\infty)$ for certain Jacobi matrices (which represent Schrödinger operators on $\ell^2(\mathbb{Z})$).

The paper is organised as follows. Section 2 states some well known facts on graphs. In Section 2, we prove Theorem 4.1.1. In Section 3, we study the bounds of the spectrum and prove Theorem 4.1.2. Finally, we treat the aymptotic behaviour of the bottom of the spectrum in the last section.

Acknowledgements I would like to thank El Maati Ouhabaz for his precious help during this work.

2 Preliminaries and notation

General setting. In this section, we fix our notations for the rest of the paper and we recall some well known facts about the Laplacian on infinite graphs. We refer to the following papers for details : [BCG], [Ch], [CG], [Del1], [DK], [DK2], [Gr], [GT], [MW], [Wo].

Let $G = (V, E, \mu)$ be a countably infinite weighted graph where V is the set of infinite number of vertices and E the set of edges connecting two vertices. We shall write (G,μ) for $G=(V,E,\mu)$. If the vertices $x,y\in V$ are connected by an edge e, we write $x\sim y$ and $e=(x,y)$. We suppose that the graph is simple, that is, it contains no loops ($e=(x,x)$) nor multiple edges. We assume that G has uniformly bounded degrees, that is $\sup\limits_{x\in V} d(x)\le D<+\infty$ where $d(x):=\#\{y\in V, y\sim x\}$ is the degree of the vertex x. Moreover, we suppose that each edge $e=(x,y)$ is assigned a positive symmetric weight $\mu(e)=\mu_{xy}=\mu_{yx}$. We can then define a function μ on vertices by $\mu(x)=\sum\limits_{y\in V, y\sim x}\mu_{xy}$. We fix an orientation on E once and for all and we define the set $\tilde{E}$ of all oriented edges $e=[x,y]$ beginning at x and terminating at y. The edge $-e:=[y,x]\in\tilde{E}$ denotes the reverse oriented edge of e.

We say that the graph G is connected if any pair of vertices x,y can be joined by a path $\{x_k\}_{k=0,\dots,n}$ with $x_0=x$, $x_n=y$ and $x_i\sim x_{i+1}$. We assume that G is connected and we define the distance $d(x,y)$ between x and y as the number of edges in the shortest path connecting them. For $x\in V$, $B(x,r):=\{y\in V, d(x,y)\le r\}$ denotes the ball of radius r.

The Laplacian. The non-negative combinatorial Laplacian $-\Delta$ acts on functions $f:V\longrightarrow\mathbb{R}$ as follows.

$$-\Delta f(x)=f(x)-\frac{1}{\mu(x)}\sum_{y\sim x}f(y)\mu_{xy}=\frac{1}{\mu(x)}\sum_{y\sim x}(f(x)-f(y))\mu_{xy}, \tag{4.1}$$

We consider the Hilbert spaces

$$\ell^2(V,\mu):=\left\{f:V\longrightarrow\mathbb{R}, \sum_{x\in V}f(x)^2\mu(x)<+\infty\right\},$$

with the inner product $\langle f,g\rangle_V=\sum_{x\in V}f(x)g(x)\mu(x)$, and the norm $||f||_V=\sqrt{\langle f,f\rangle_V}$, for $f\in\ell^2(V,\mu)$, and

$$\ell^2(\tilde{E},\mu):=\left\{\phi:\tilde{E}\longrightarrow\mathbb{R},\ \phi(-e)=-\phi(e)\text{ and }\sum_{e\in E}\phi(e)^2\mu(e)<+\infty\right\},$$

with the inner product $\langle\phi,\psi\rangle_{\tilde{E}}=\frac{1}{2}\sum_{e\in\tilde{E}}\phi(e)\psi(e)\mu(e)=\sum_{e\in E}\phi(e)\psi(e)\mu(e)$, and the norm $||\phi||_{\tilde{E}}=\sqrt{\langle\phi,\phi\rangle_{\tilde{E}}}$, for $f\in\ell^2(\tilde{E},\mu)$.

In this setting, one defines the gradient operator $\nabla:\ell^2(V,\mu)\longrightarrow\ell^2(\tilde{E})$: for all $e\in\tilde{E}$

$$\nabla f(e)=\nabla f([x,y])=f(y)-f(x). \tag{4.2}$$

The gradient ∇ is bounded on $\ell^2(V,\mu)$ and its norm satisfies $||\nabla||\le\sqrt{2}$. Its adjoint operator $\nabla^* : \ell^2(\tilde{E}) \longrightarrow \ell^2(V,\mu)$ is given by

$$\nabla^*\phi(x) = -\frac{1}{\mu(x)} \sum_{e=[x,y]\in\tilde{E}} \phi(e)\mu(e) \tag{4.3}$$

for all $x \in V$ and a direct computation shows that

$$-\Delta = \nabla^*\nabla. \tag{4.4}$$

In particular, $-\Delta$ is a bounded non-negative self-adjoint operator on $\ell^2(V,\mu)$ whose norm satisfies $||-\Delta|| \leq 2$. Therefore, the spectrum satisfies $\sigma(-\Delta) \subset [0,2]$ and it is a question of interest to know if the bottom of the spectrum $s(-\Delta) := \inf \sigma(-\Delta)$ is equal to 0 or not.

The bottom of the spectrum. It is well known ([RS]) that $s(-\Delta)$ is caracterised by the Min-Max principle as the infimum of the Rayleigh-Ritz quotient.

$$s(-\Delta) = \inf_{f\in\ell^2(V,\mu)-\{0\}} \frac{\langle -\Delta f, f\rangle_V}{\langle f, f\rangle_V} = \inf_{f\in\ell^2(V,\mu)-\{0\}} \frac{\langle \nabla f, \nabla f\rangle_{\tilde{E}}}{\langle f, f\rangle_V} = \inf_{f\in\ell^2(V,\mu)-\{0\}} \frac{||\nabla f||^2_{\tilde{E}}}{||f||^2_V}.$$

Moreover, $s(-\Delta)$ is also related to the geometry of the graph by its Cheeger's constant. Let $\delta N := \{e = (x,y) \in E,\, x \in N,\, y \notin N\}$ be the edges boundary of N and $\mu(\delta N) := \sum_{e\in\delta N} \mu(e)$ be its length. Let $\mu(N) = \sum_{x\in N} \mu(x)$ be the volume of N. Then, the Cheeger's constant of the graph is defined by $h := \inf\limits_{N\subset V} \dfrac{\mu(\delta N)}{\mu(N)}$, where N runs over all finite subsets of V. Then, it is well known that $s(-\Delta) = 0 \Longleftrightarrow h = 0$ (see [DK] for unweighted graphs and this can be generalized to weighted graphs). This is the case when G has sub-exponential growth $(\liminf\limits_{r\to+\infty} (\mu(B(x_0,r)))^{1/r} = 1)$ or if G is the Cayley graph of an amenable group. We refer to [DK] for details concerning these facts.

The Laplacian on a subgraph. Let us consider a subset S of V, which can be infinite or not connected. Let $E_S := \{e = (x,y) \in E,\, x, y \in S\} \subset E$ be the set of edges connecting two points in S and $\tilde{E_S}$ the set of oriented edges in E_S. By abuse of notation, we will sometimes write S for the subgraph $G_S := (S, E_S)$. For all $x \in S$, let $\mu_S(x) := \sum\limits_{y\in S, y\sim x} \mu_{xy} \leq \mu(x)$ be the weight of x in S.

The non-negative Laplacian on S $-\Delta_S$ acts on functions $f : S \longrightarrow \mathbb{R}$ as follows.

$$-\Delta_S f(x) = f(x) - \frac{1}{\mu_S(x)} \sum_{\substack{y\sim x\\ y\in S}} f(y)\mu_{xy} = \frac{1}{\mu_S(x)} \sum_{\substack{y\sim x\\ y\in S}} (f(x) - f(y))\mu_{xy}. \tag{4.5}$$

Let $\ell^2(S,\mu_S)$ be the Hilbert space of real valued functions on S with the scalar product $\langle f,g\rangle_S = \sum_{x\in S} f(x)g(x)\mu_S(x)$. In the same way, $\ell^2(\tilde{E_S},\mu_S)$ is the Hilbert space of real valued functions ϕ on $\tilde{E_S}$ such that $\phi(-e) = -\phi(e)$ with the scalar product $\langle \phi,\psi\rangle_{\tilde{E_S}} = \frac{1}{2}\sum_{e\in\tilde{E_S}} \phi(e)\psi(e)\mu(e)$. Now, we define the gradient operator ∇_S : $\ell^2(S,\mu_S) \longrightarrow \ell^2(\tilde{E_S})$: for all $e\in\tilde{E_S}$ $\nabla_S f(e) = \nabla_S f([x,y]) = f(y)-f(x)$. Note that $\nabla f(e) = \nabla_S f(e)$ for all $e\in E_S$. Morevover, ∇_S is a bounded operator on $\ell^2(S,\mu_S)$ and a direct computation shows that $-\Delta_S = \nabla_S^*\nabla_S$. Then $-\Delta_S$ is a bounded non-negative self-adjoint operator on $\ell^2(S,\mu_S)$ and $\sigma(-\Delta_S)\subset[0,2]$.

The first non-zero eigenvalue of a finite connected graph and Poincaré inequality. When the subgraph S is finite and connected, the spectrum consists on eigenvalues with finite multiplicity. 0 is always an eigenvalue with multiplicity equal to 1 and the corresponding eigenvector is the constant vector $\mathbb{1}$ with all components equal to 1. Then, we have $\sigma(-\Delta_S) = \{\eta_0(S) = 0 < \eta_1(S)\le\cdots\le\eta_n(S)\}$ and one is interested in bounding the first non-zero eigenvalue $\eta_1(S)$. Following the proof of [Ch] Lemma 1.9 for unweighted graphs, one can easily compute a lower bound on $\eta_1(S)$ for weighted finite connected graphs.

Proposition 4.2.1. *Let S be a finite connected weighted graph. If D_S denotes the diameter of S, that is the maximum distance between any two vertices of S, then we have*

$$\eta_1(S) \ge \frac{\mu_0(S)}{\mu(S)D_S},$$

where $\mu_0(S) = \min_{e\in S}\mu(e)$ and $\mu(S)$ is the weight of S.

The Laplacian with Dirichlet boundary conditions. Let us consider a subset S of V, which can be infinite or not connected. In order to introduce the Laplacian with Dirichlet boundary conditions, we define the following sets associated with S. The vertices boundary of S : $\partial S := \{x\notin S,\ \exists y\in S,\ y\sim x\}$. The edges boundary of S : $\delta S := \{e=(x,y)\in E,\ x\in S,\ y\notin S\}$. The interior of S : $\mathring{S} := \{x\in S,\ y\sim x \Rightarrow y\in S\}$, which can be empty. We also define the sets $S^* := S\cup\partial S$ and $E_S^* := E_S\cup\partial S$. By abuse of notation, we will write S^* for the subgraph $G_{S^*} := (S^*, E_{S^*})$.

For any subset S of V, the Dirichlet Laplacian $-\Delta_S^D$ acts on functions $f: S^*\longrightarrow\mathbb{R}$ which satisfy the Dirichlet boundary condition (DBC) :

$$f(x) = 0 \text{ for all } x\in\partial S. \qquad (DBC)$$

It is defined by $-\Delta_S^D f(x) = \begin{cases} -\Delta f(x) & \text{if } x\in S,\\ 0 & \text{if } x\in\partial S.\end{cases}$

3 The bottom of the spectrum

Let $G = (V, E, \mu)$ be a countably infinite connected weighted graph and $-\Delta$ be the non-negative combinatorial Laplacian on G. Let $b : V \longrightarrow \mathbb{R}$ be a real-valued bounded potential on V and λ a non-negative coupling constant. We define the combinatorial Schrödinger operator $H(\lambda) := -\Delta + \lambda b$ and we note $s(\lambda) := s(-\Delta+\lambda b) := \inf \sigma(-\Delta+\lambda b)$ the bottom of its spectrum. We introduce the following hypotheses on G which may or may not hold in general.

- The graph G has uniformly bounded degrees (UBD) if there exists a constant $D > 0$ such that for all $x \in V$

$$d(x) \leq D < +\infty. \tag{UBD}$$

- The graph G satisfies the Poincaré inequality $(PI(R))$ for some $R > 0$ if there exists a constant $C(R) > 0$ depending only on R such that for all $x \in V$, for any function f on V

$$\sum_{y \in B(x,R)} |f(y) - f_{B(x,R)}|^2 \mu_B(y) \leq C_1(R) \sum_{x,y \in B(x,R), x\sim y} (f(x) - f(y))^2 \mu_{xy}, \tag{$PI(R)$}$$

where $\mu(B(x, R)) := \sum_{y \in B(x,R)} \mu_B(y)$ is the weight of the ball $B(x, R)$ and $f_{B(x,R)}$ is the average of f on the ball $B := B(x, R) : f_{B(x,R)} := \frac{\sum_{y \in B(x,R)} f(y)\mu_B(y)}{\mu(B(x,R))}$.

When the graph G satisfies (UBD) and $(PI(R))$, we prove that the behaviour of $s(\lambda)$ is related to the following mean condition $(MC(\delta, R))$ on the potential b as it is stated in the introduction in Theorem 4.1.1. The potential b satisfies the condition $(MC(\delta, R))$ for some $\delta > 0$ and $R > 0$ if

$$\frac{1}{\mu(B(x, R))} \sum_{y \in B(x,R)} b(y)\mu_B(y) \geq \delta \text{ for all } x \in V. \tag{$MC(\delta, R)$}$$

Let us make some remarks on the assumptions (UBD) and $(PI(R))$. We introduce the following properties on G which may or may not hold in general.

- The graph G has uniformly bounded weights (UBW) if there exists two constants $m, M > 0$ such that for all $e = (x, y) \in E$

$$m \leq \mu_{xy} \leq M. \tag{UBW}$$

- The graph G has bounded weight variation $(BWV(R))$ for some $R > 0$ if there exists a constant $K(R) > 0$ depending only on R such that for all $x \in V$

$$\mu_1(B(x, R)) \leq K(R)\mu_0(B(x, R)), \tag{$BWV(R)$}$$

where $\mu_1(B(x, R)) := \max_{(y,z) \in E_{B(x,R)}} \mu_{y,z}$ and $\mu_0(B(x, R)) := \min_{(yz) \in E_{B(x,R)}} \mu_{yz}$.

- The graph G satisfies the property $(UBE(R))$ (uniformly bounded eigenvalue) if there exists a constant $C_2(R) > 0$ depending only on R such that for all $x \in V$

$$\eta_1(-\Delta_{B(x,R)}) \geq C_2(R), \qquad (UBE(R))$$

where $\eta_1(-\Delta_{B(x,R)})$ is the first non zero eigenvalue of the Laplacian $-\Delta_{B(x,R)}$ on $B(x,R)$.

The following proposition shows how these properties are related to our assumptions on the graph. Indeed, properties (UBD), (UBW) and $(BWV(R))$ can be usefull since they are easy to check even if they are more restrictive. This is the case for the standard weight ($\mu_{xy} = 1$ everywhere) for example.

Proposition 4.3.1. *1. $(PI(R)) \iff (UBE(R))$.*

2. $(UBD) + (UBW) \Longrightarrow (UBE(R))$ (and then $(PI(R))$) for any $R > 0$.

3. $(UBD) + (BWV(R)) \Longrightarrow (UBE(R))$ (and then $(PI(R))$).

Proof. 1. By definition of $f_{B(x,R)}$, we have $\left\langle f - f_{B(x,R)}, \mathbb{1}\right\rangle_{B(x,R)} = 0$, where $\mathbb{1}$ is the constant function on $B(x,R)$ with all components equal to 1. Therefore, we can write $(PI(R))$ as follows : there exist a constant $C_1(R) > 0$ depending only on R such that for all $x \in V$ and for any function f on V such that $\langle f, \mathbb{1}\rangle_{B(x,R)} = 0$

$$\frac{||\nabla f||^2_{E_{B(x,R)}}}{||f||^2_{B(x,R)}} \geq \frac{1}{C_1(R)}.$$

Since each ball $B(x,R)$ is connected, $\eta_0(-\Delta_{B(x,R)}) = 0$ is a simple eigenvalue with corresponding eigenvector $\mathbb{1}$. Hence, we can conclude using the variational characterisation of $\eta_1(-\Delta_{B(x,R)}) := \inf\limits_{f \neq 0, f \perp \mathbb{1}} \dfrac{||\nabla f||^2_{E_{B(x,R)}}}{||f||^2_{B(x,R)}}$.

2. This is a consequence of the lower bound on $\eta_1(S)$ established in Proposition 4.2.1 for the Laplacian on any finite graph S. Let $R > 0$ and take $S = B(x,R)$. We have $D(B(x,R)) = 2R$ and Proposition 4.2.1 implies that

$$\eta_1(-\Delta_{B(x,R)}) \geq \frac{\mu_0(B(x,R))}{2R\mu(B(x,R))} \geq \frac{m}{2R\mu(B(x,R))}.$$

Now, using the upper bound in (UBW) and (UBD), an easy calculation shows that $\mu(B(x,R) \leq MD^{R+2}$. Finally, we obtain

$$\eta_1(B(x,R)) \geq \frac{m}{2MRD^{R+2}} = C_2(R).$$

3. Let $R > 0$ such that $(BWV(R))$ is satisfied. We have

$$\frac{\mu(B(x,R))}{\mu_0(B(x,R))} = \sum_{y\in B(x,R)} \sum_{\substack{z\in B(x,R)\\ z\sim y}} \frac{\mu_{yz}}{\mu_0(B(x,R))} \leq \sum_{y\in B(x,R)} \sum_{z\sim y} \frac{\mu_1(B(x,R))}{\mu_0(B(x,R))}$$
$$\leq K(R) \sum_{y\in B(x,R)} d(y).$$

Using (UBD), we find $\dfrac{\mu(B(x,R))}{\mu_0(B(x,R))} \leq K(R)D^{R+2}$ and Proposition 4.2.1 implies that

$$\eta_1(B(x,R)) \geq \frac{\mu_0(B(x,R))}{2R\mu(B(x,R))} \geq \frac{1}{2RK(R)D^{R+2}}.$$

□

Before we get to the proof of Theorem 4.1.1, we establish some preliminary results.

3.1 Two lemmas

The following lemma establishes a covering property for infinite graphs which satisfy (UBD).

Lemma 4.3.2. *Let $R \in \mathbb{N} - \{0\}$ and $G = (V, E, \mu)$ be an infinite connected weighted graph wich satisfies (UBD).*

Then there exists a sequence $(x_i)_{i\in\mathbb{N}} \subset V$ such that $G = \bigcup_{i\geq 0} B(x_i, R)$. Moreover, there exists an integer $N \in \mathbb{N} - \{0\}$ depending only on R such that any vertice in V or any edge in E is contained in at most N distincts balls $B(x_i, R)$.

Here, $G = \bigcup_{i\geq 0} B(x_i, R)$ means that $V = \bigcup_{i\geq 0} B(x_i, R)$ and $E = \bigcup_{i\geq 0} E_{B(x_i,R)}$.

Proof. We recall that $E_{B(x_i,R)} = \{e = (x, y), x, y \in B(x_i, R)\}$. For simplicity, we will write B_i either for the ball $B(x_i, R)$ or for the set of edges $E_{B(x_i,R)}$. Let us take $(x_i)_{i\in\mathbb{N}} = V$. Then it is clear that $V = \bigcup_{i\geq 0} B_i$. Moreover, since $R \geq 1$, any edge e with origin $x \in V$ is contained in the ball $B(x, R) = B(x_j, R)$ for some $j \in \mathbb{N}$ since $V = (x_i)_{i\in\mathbb{N}}$. Thus, we have $E = \bigcup_{i\geq 0} B_i$.

Now, we need to show that the cardinality of the set $I_x := \{i \in \mathbb{N}, x \in B_i\}$ is uniformly bounded. Let us fix $x \in V$. For all $i \in I_x$, we have $d(x, x_i) \leq R$ and then $x_i \in B(x, R)$. This implies that the cardinal of I_x is bounded by the number of vertices in $B(x, R)$. Since G satisfies (UBD), we have $\#(I_x) \leq \#(B(x, R)) \leq D^{R+1}$. Finally, any vertice in V is contained in at most $N = D^{R+1}$ balls B_i. Moreover, if there exist an edge $e = (x, y)$ which is contained in most than N balls, so does the vertex x. This is not possible. Hence, each edge is also contained in at most N balls B_i. □

Proposition 4.3.3. *Let $(x_i)_{i\in\mathbb{N}} \subset V$ be a set of vertices satisfying the covering property of Lemma 4.3.2. For $x \in V$, let $I_x := \{i \in \mathbb{N}, x \in B(x_i, R)\}$. Then, we have $\displaystyle\sum_{i\in I_x} \mu_{B_i}(x) \geq \mu(x)$.*

Proof. We write B_i for $B(x_i, R)$. Let y be a neighboor of x in V. If $y \notin B_i$ for any $i \in I_x$, then the edge (x, y) is not in B_i for any $i \in I_x$. By Lemma 4.3.2, we have $E = \bigcup_{k\geq 0} B_k$ so there exists $j \notin I_x$ such that $(x, y) \in B_j$. Then $x \in B_j$ and $j \in I_x$ which is a contradiction. Therefore, we have $\{y \in V, y \sim x\} \subset \bigcup_{i\in I_x} \{y \in B_i, y \sim x\}$. This relation clearly implies that $\mu(x) = \sum_{y\in V, y\sim x} \mu_{xy} \leq \sum_{y\in\bigcup_{i\in I_x} B_i, y\sim x} \mu_{xy} \leq \sum_{i\in I_x} \sum_{y\in B_i, y\sim x} \mu_{xy} = \sum_{i\in I_x} \mu_{B_i}(x)$. ☐

The second result is related to the restriction of the Schrödinger operator $H = -\Delta + \lambda b$ on a ball $B(x, R)$, where b is a bounded potential. Let $H_x(\lambda) := -\Delta_{B(x,R)} + \lambda b$ where $-\Delta_{B(x,R)}$ is defined by (4.5) and b_x is the restriction of the potential b on $B(x, R)$. Let $s_x(\lambda) := \inf \sigma(H_x(\lambda))$.

Lemma 4.3.4. *Assume that G satisfies (UBD) and $(UBE(R))$ (which is equivalent to $(PI(R))$) for some $R > 0$. Assume that the potential b is bounded.*

If there exists $\delta > 0$ such that the potential b satisfies $(MC(\delta, R))$, then there exists a constant $\epsilon > 0$ such that $s_x(\lambda) \geq \lambda\frac{\delta}{2}$ for all $\lambda \in (0, \epsilon)$, for all $x \in V$. Moreover, ϵ depends only on R and δ.

Proof. We follow similar ideas as in [Ak]. Let us denote by B_x the ball $B(x, R)$ and let $N := \#B_x$ be the number of vertices in B_x. We identify the space of functions acting on B_x with the vector space $\mathbb{R}^N$ with the scalar product $\langle f, g\rangle = \sum_{y\in B_x} f(y)g(y)\mu_{B_x}(y)$ and norm $||f||^2 = \langle f, f\rangle$. Since B_x is connected, $-\Delta_{B_x}$ is a non-negative operator with kernel $Ker(-\Delta_{B_x}) = \mathbb{R}\mathbb{1}$ where $\mathbb{1}$ is the vector in $\mathbb{R}^N$ with all components equal to 1. We use the decomposition $\mathbb{R}^N = \mathbb{R}\mathbb{1} \oplus (\mathbb{R}\mathbb{1})^\perp$ and write, for all u in $\mathbb{R}^N$, $u = \alpha\mathbb{1} + y$ with $\alpha \in \mathbb{R}$ and $y \in (\mathbb{R}\mathbb{1})^\perp$. Then, we have

$$\begin{aligned}
\langle H_x(\lambda)u, u\rangle &= \langle -\Delta_{B_x} u, u\rangle + \lambda \langle bu, u\rangle \\
&= \langle -\Delta_{B_x}(\alpha\mathbb{1} + y), (\alpha\mathbb{1} + y)\rangle + \lambda \langle b(\alpha\mathbb{1} + y), (\alpha\mathbb{1} + y)\rangle \\
&= \langle -\Delta_{B_x} y, y\rangle + \lambda \left[\alpha^2 \langle b\mathbb{1}, \mathbb{1}\rangle + 2\alpha \langle b\mathbb{1}, y\rangle + \langle by, y\rangle\right].
\end{aligned}$$

Since $y \in (\mathbb{R}\mathbb{1})^\perp$, $(UBE(R))$ implies that $\langle -\Delta_{B_x} y, y\rangle \geq C_2(R)||y||^2$ for some constant $C_2(R) > 0$ depending only on R. Moreover, using condition $(MC(\delta, R))$, we find that $\langle b\mathbb{1}, \mathbb{1}\rangle = \sum_{y\in S} b(y)\mu_{B_x}(y) \geq \delta\mu(B_x) = \delta||\mathbb{1}||^2$. Finally, using the Cauchy-Schwarz inequality for the terms $\langle b\mathbb{1}, y\rangle$ and $\langle by, y\rangle$ and using the fact that b is bounded, we obtain

$$\begin{aligned}
\langle H_x(\lambda)u, u\rangle &\geq C_2(R)||y||^2 + \lambda \left[\alpha^2\delta||\mathbb{1}||^2 - 2\alpha||b\mathbb{1}||||y|| - ||by||||y||\right] \\
&\geq C_2(R)||y||^2 + \lambda \left[\alpha^2\delta||\mathbb{1}||^2 - 2\alpha||b||_\infty||\mathbb{1}||||y|| - ||b||_\infty||y||^2\right].
\end{aligned}$$

Without a loss of generality, we can suppose that $||b||_\infty = 1$ and hence

$$\langle H_x(\lambda)u, u\rangle \geq C_2(R)||y||^2 + \lambda \left[\alpha^2\delta||\mathbb{1}||^2 - 2\alpha||\mathbb{1}||||y|| - ||y||^2\right].$$

For $\gamma > 0$ to be choosen, we use the trivial formula : $2ts \leq (\gamma t^2 + \frac{1}{\gamma}s^2)$ with $t = \alpha||\mathbb{1}||_x$ and $s = ||y||_x$. We obtain

$$\begin{aligned}\langle H_x(\lambda)u, u\rangle &\geq C_2(R)||y||^2 + \lambda \left[\alpha^2\delta||\mathbb{1}||^2 - (\gamma\alpha^2||\mathbb{1}||^2 + \frac{1}{\gamma}||y||^2 + ||y||^2)\right] \\ &\geq \left(C_2(R) - \lambda(1+\frac{1}{\gamma})\right)||y||^2 + \lambda\left(\delta-\gamma\right)\alpha^2||\mathbb{1}||^2.\end{aligned}$$

Now we choose $\gamma = \frac{\delta}{2} > 0$. For $0 < \lambda \leq \epsilon = \frac{C_2(R)}{1+\gamma+\frac{1}{\gamma}}$ we have $C_2(R) - \lambda(1+\frac{1}{\gamma}) \geq \lambda\gamma = \lambda\frac{\delta}{2}$. Therefore, for all $\lambda \in (0, \epsilon)$, we have

$$\langle H_x(\lambda)u, u\rangle \geq \lambda\frac{\delta}{2}(||y||^2 + ||\alpha\mathbb{1}||^2) = \lambda\frac{\delta}{2}||u||^2$$

and the result follows from the min-max principle.

Finally, since $C_2(R)$ and $\gamma = \frac{\delta}{2}$ only depend on R and δ, so does $\epsilon = \frac{C_2(R)}{1+\gamma+\frac{1}{\gamma}}$. □

3.2 Non-negative potentials.

In this section, we consider the Schrödinger operator $H(\lambda) = -\Delta + \lambda b$ with a bounded non-negative potential $b : V \longrightarrow \mathbb{R}$ and we prove

Theorem 4.3.5. *Assume that G satisfies (UBD) and $(UBE(R))$ for some $R > 0$. Assume that the potential b is bounded and non-negative.*

If there exists $\delta > 0$ such that the potential b satisfies $(MC(\delta, R))$, then $s(\lambda) > 0$ for all $\lambda > 0$.

Note that $s(0) = s(-\Delta) \geq 0$ since $-\Delta$ is non-negative. When the graph satisfies $s(-\Delta) > 0$, the non-negativity of the potential implies that $s(\lambda) \geq s(-\Delta) > 0$ for all $\lambda \geq 0$ and the result is trivial. However, as mentioned in Section 2, it can happen that $s(0) = s(-\Delta) = 0$, when the Cheeger's constant h of the graph is 0. For example, this is the case if the graph G has sub-exponential growth or if G is the Cayley graph of an amenable group (see [DK]).

Proof. Let $R > 0$ be as in the theorem. We have

$$\langle H(\lambda)u, u\rangle_V = \frac{1}{2}\sum_{e\in\tilde{E}} |\nabla u(e)|^2\mu(e) + \lambda\sum_{x\in V} b(x)u(x)^2\mu(x). \tag{4.6}$$

By Lemma 4.3.2, we can find a sequence $(x_i)_{i\in\mathbb{N}} \subset V$ and an integer $N \in \mathbb{N} - \{0\}$ such that $G = \bigcup_{i\geq 0} B(x_i, R)$ and any vertice in V or any edge in $\tilde{E}$ is contained in at most N balls $B(x_i, R)$. For the rest of the proof, we write B_i either for the ball $B(x_i, R)$ or for the set $\tilde{E}_{B_i}$ of all oriented edges in B_i.

We treat the first term. For e in $\tilde{E}$, we introduce $I_e := \{i \in \mathbb{N}, e \in B_i\}$. Then, we have $\sum_{i\in\mathbb{N}} \sum_{e\in B_i} |\nabla u(e)|^2\mu(e) = \sum_{e\in\tilde{E}} \sum_{i\in I_e} |\nabla u(e)|^2\mu(e) \leq N \sum_{e\in\tilde{E}} |\nabla u(e)|^2\mu(e)$ since $\#I_e \leq N$ according to Lemma 4.3.2. Thus, we obtain

$$\sum_{e\in\tilde{E}} |\nabla u(e)|^2\mu(e) \geq \frac{1}{N} \sum_{i\in\mathbb{N}} \sum_{e\in B_i} |\nabla u(e)|^2\mu(e). \tag{4.7}$$

Let us now treat the second term. For $x \in V$, we set $I_x := \{i \in \mathbb{N}, x \in B_i\}$. By Lemma 4.3.2, we have $\#I_x \leq N$.Moreover since the potential b is non-negative, we have

$$\begin{aligned}\sum_{i\in\mathbb{N}} \sum_{x\in B_i} b(x)u(x)^2\mu_{B_i}(x) = \sum_{x\in V} \sum_{i\in I_x} b(x)u(x)^2\mu_{B_i}(x) &\leq \sum_{x\in V} \sum_{i\in I_x} b(x)u(x)^2\mu(x)\\ &\leq N \sum_{x\in V} b(x)u(x)^2\mu(x).\end{aligned}$$

Hence

$$\sum_{x\in V} b(x)u(x)^2\mu(x) \geq \frac{1}{N} \sum_{i\in\mathbb{N}} \sum_{x\in B_i} b(x)u(x)^2\mu_{B_i}(x). \tag{4.8}$$

Summing (4.7) and (4.8), we find the following estimate for (4.6)

$$\begin{aligned}\langle H(\lambda)u, u\rangle_V &\geq \frac{1}{N} \sum_{i\in\mathbb{N}} (\frac{1}{2} \sum_{e\in \tilde{E_{B_i}}} |\nabla u(e)|^2\mu(e) + \lambda \sum_{x\in B_i} b(x)u(x)^2)\mu_{B_i}(x)\\ &\geq \frac{1}{N} \sum_{i\in\mathbb{N}} (\frac{1}{2} \sum_{e\in \tilde{E_{B_i}}} |\nabla_{B_i} u_i(e)|^2\mu(e) + \lambda \sum_{x\in B_i} b(x)u_i(x)^2)\mu_{B_i}(x),\end{aligned}$$

where $u_i := u|_{B_i}$ is the restriction of u to the ball B_i and $\nabla_{B_i} u_i(e) = \nabla u(e)$ since $e \in B_i$. Therefore, we obtain

$$\begin{aligned}\langle H(\lambda)u, u\rangle_V &\geq \frac{1}{N} \sum_{i\in\mathbb{N}} \left(\langle \nabla_{B_i} u_i, \nabla_{B_i} u_i\rangle_{\tilde{E_{B_i}}} + \lambda \langle b u_i, u_i\rangle_{B_i} \right)\\ &= \frac{1}{N} \sum_{i\in\mathbb{N}} \left(\langle -\Delta_{B_i} u_i, u_i\rangle_{\tilde{E_{B_i}}} + \lambda \langle b u_i, u_i\rangle_{B_i} \right)\\ &\geq \frac{1}{N} \sum_{i\in\mathbb{N}} \langle H_{B_i}(\lambda) u_i, u_i\rangle_{B_i}.\end{aligned}$$

Now, we apply Lemma 4.3.4 to each operator H_{B_i}. Then, there exists a constant $\epsilon > 0$ depending only on R and δ such that for all $i \in \mathbb{N}$

$$\langle H_{B_i}(\lambda) u_i, u_i\rangle_{B_i} \geq \lambda \frac{\delta}{2} ||u_i||_{B_i}.$$

Since ϵ does not depend on i, we have, for all λ in $(0, \epsilon)$

$$\langle H(\lambda)u, u\rangle_V \geq \frac{1}{N}\sum_{i\in\mathbb{N}} \lambda\frac{\delta}{2}||u||^2_{B_i} \geq \frac{\lambda\delta}{2N}\sum_{i\in\mathbb{N}} ||u||^2_{B_i} \geq \frac{\lambda\delta}{2N}||u||^2_V.$$

The last inequality follows from the relation $\sum_{i\in I_x} \mu_{B_i}(x) \geq \mu(x)$ (see Proposition 4.3.3). Indeed, we have

$$\sum_{i\in\mathbb{N}} ||u||^2_{B_i} = \sum_{i\in\mathbb{N}}\sum_{x\in B_i} u^2(x)\mu_{B_i}(x) = \sum_{x\in V}\sum_{i\in I_x} u^2(x)\mu_{B_i}(x) \geq \sum_{x\in V} \mu(x)u^2(x) = ||u||^2_V.$$

Now, the min-max principle implies that for all λ in $(0, \epsilon)$,

$$s(\lambda) \geq \frac{\lambda\delta}{2N} > 0.$$

Since the potential b is non-negative, we have $s(\lambda) \geq s(\lambda')$ for $\lambda \geq \lambda'$ and the theorem is proved. □

Assume that b is not bounded. If the graph satisfies (UBD) and (UBW), one can use the previous theorem for truncations of b and obtain the same result for unbounded potentials. See the proof of Theorem 12. in [Ak].

3.3 Potentials with indefinite sign.

In this section, we investigate the same problem with bounded real valued potentials $b = b^+ - b^-$ of indefinite sign, where b^+ and $b-$ are non-negative. When the negative part b^- is not zero, we have $\lim_{\lambda\to+\infty} s(\lambda) = -\infty$. Indeed, there exists $x_0 \in V$ such that $b^-(x_0) > 0$ and if we consider the function $e_{x_0}(x) = \delta_{x_0,x}$ then we obtain $s(\lambda) = \inf_{u\in\ell^2(V)} \frac{||\nabla u||^2 + \lambda\langle bu, u\rangle}{||u||^2} \leq \frac{||\nabla e_{x_0}||^2 + \lambda\langle be_{x_0}, e_{x_0}\rangle}{||e_{x_0}||^2} \longrightarrow -\infty$ as $\lambda \to +\infty$. Hence, $s(\lambda) < 0$ for large values of λ. The following result gives conditions on the potential b such that $s(\lambda) > 0$ for $\lambda > 0$ and small enough. It is inspired by Theorem 4 in [Ou1].

Theorem 4.3.6. *Assume that G satisfies (UBD) and $(UBE(R))$ for some $R > 0$. Assume that the potential $b = b^+ - b^-$ is bounded and satisfies one of the two following conditions.*

1. *The potential $\tilde{b} := b^+ - Nb^-$ satisfies the mean condition $(MC(\delta, R))$ for some $\delta > 0$. The constant N is the one given by Lemma 4.3.2.*
2. *The positive part of the potential b^+ satisfies the mean condition $(MC(\delta, R))$ for some $\delta > 0$ and the negative part b^- vanishes at infinity.*

Then $s(\lambda) > 0$ for all $\lambda \in (0, \epsilon)$ for some $\epsilon > 0$.

Proof. We assume that the potential b satisfies the first condition. We have

$$\langle H(\lambda)u,u\rangle_V = \frac{1}{2}\sum_{e\in E}|\nabla u(e)|^2\mu(e) + \lambda\sum_{x\in V} b^+(x)u(x)^2\mu(x) - \lambda\sum_{x\in V} b^-(x)u(x)^2\mu(x).$$

As in the proof of Theorem 4.3.5, we use Lemma 4.3.2 which assures that there exist a sequence $(x_i)_{i\in\mathbb{N}}\subset V$ and an integer $N\in\mathbb{N}-\{0\}$ such that $G=\bigcup_{i\geq 0} B(x_i,R)$. In the following, we write B_i either for the ball $B(x_i,R)$ or for the set of edges $E_{B(x_i,R)}$.

Concerning the positive part of the potential, we can write as in the proof of Theorem 4.3.5

$$\frac{1}{2}\sum_{e\in E}|\nabla u(e)|^2\mu(e) + \lambda\sum_{x\in V} b^+(x)u(x)^2\mu(x) \geq \\ \frac{1}{N}\sum_{i\in\mathbb{N}}\left(\frac{1}{2}\sum_{e\in B_i}|\nabla u(e)|^2\mu(e) + \lambda\sum_{x\in B_i} b^+(x)u(x)^2\right)\mu_{B_i}(x).$$

Concerning the negative part of the potential, we introduce $I_x := \{i\in\mathbb{N}, x\in B_i\}$ for $x\in V$. Lemma 4.3.2 implies that

$$\sum_{i\in\mathbb{N}}\sum_{x\in B_i} b^-(x)u(x)^2\mu_{B_i}(x) = \sum_{x\in V}\sum_{i\in I_x} b^-(x)u(x)^2\mu_{B_i}(x).$$

Moreover, according to Proposition 4.3.3, we have $\sum_{i\in I_x}\mu_{B_i}(x)\geq\mu(x)$ for all $x\in V$. Finally, using the fact that b^- is non-negative, we obtain

$$\sum_{i\in\mathbb{N}}\sum_{x\in B_i} b^-(x)u(x)^2\mu_{B_i}(x) = \sum_{x\in V}\sum_{i\in I_x} b^-(x)u(x)^2\mu_{B_i}(x) \geq \sum_{x\in V} b^-(x)u(x)^2\mu(x),$$

and then

$$-\sum_{x\in V} b^-(x)u(x)^2\mu(x) \geq -\frac{1}{N}\sum_{i\in\mathbb{N}}\sum_{x\in B_i} Nb^-(x)u(x)^2\mu_{B_i}(x).$$

Finally, we find

$$\begin{aligned}
\langle H(\lambda)u,u\rangle_V &\geq \frac{1}{N}\sum_{i\in\mathbb{N}}\left(\frac{1}{2}\sum_{e\in E_{B_i}}|\nabla u(e)|^2\mu(e) + \lambda\sum_{x\in B_i}\left(b^+(x)-Nb^-(x)\right)u(x)^2\mu_{B_i}(x)\right)\\
&\geq \frac{1}{N}\sum_{i\in\mathbb{N}}\left(\langle\nabla u,\nabla u\rangle_{E_{B_i}} + \lambda\left\langle\tilde{b}u,u\right\rangle_{B_i}\right)\\
&= \frac{1}{N}\sum_{i\in\mathbb{N}}\left\langle\tilde{H}_{B_i}(\lambda)u,u\right\rangle_{B_i},
\end{aligned}$$

where $\tilde{b}=b^+-Nb^-$ and $\tilde{H}_{B_i}(\lambda)=-\Delta_{B_i}+\lambda\tilde{b}$. By assumption, $\tilde{b}$ satisfies the mean condition $(MC(\delta,R))$ and we can use Lemma 4.3.4. The end of the proof is the same as in Theorem 4.3.5. We can then conclude that $s(\lambda)>0$ for all $\lambda\in(0,\epsilon)$ for some

$\epsilon > 0$.

Now, we assume that the potential satisfies the second condition. Let us fix x_0 in V and let $\eta > 0$ to be choosen later. Since b^- vanishes at infinity, there exists $R_0 > 0$ such that $b^-(x) < \eta$ for all $x \in B_{R_0}^c$ where $B_{R_0} := B(x_0, R_0)$ and $B_{R_0}^c := V - B_{R_0}$ is the complement of B_{R_0}. The relation

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\sum_{e\in E}|\nabla u(e)|^2\mu(e) + \lambda\sum_{x\in V} b^+(x)u(x)^2\mu(x) - \lambda\sum_{x\in V} b^-(x)u(x)^2\mu(x) = \\
&\quad \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}\sum_{e\in E}|\nabla u(e)|^2\mu(e) + \lambda\sum_{x\in V} b^+(x)u(x)^2\mu(x) - \lambda\sum_{x\in V} 2b^-(x)\chi_{B_{R_0}}(x)u(x)^2\mu(x)\right] \\
&\quad + \frac{1}{2}\left[\frac{1}{2}\sum_{e\in E}|\nabla u(e)|^2\mu(e) + \lambda\sum_{x\in V} b^+(x)u(x)^2\mu(x) - \lambda\sum_{x\in V} 2b^-(x)\chi_{B_{R_0}^c}(x)u(x)^2\mu(x)\right]
\end{aligned}$$

implies that $s(\lambda) \geq \frac{1}{2}\underbrace{s(-\Delta + \lambda(b^+ - 2b^-\chi_{B_{R_0}}))}_{A(\lambda)} + \frac{1}{2}\underbrace{s(-\Delta + \lambda(b^+ - 2b^-\chi_{B_{R_0}^c}))}_{B(\lambda)}$, where $\chi_{B_{R_0}}$ is the characteristic function of B_{R_0}. Let us prove that $A(\lambda) \geq 0$ and $B(\lambda) > 0$ for $\lambda > 0$ and small enough.

We start with $B(\lambda)$. Since $b^-\chi_{B_{R_0}^c} < \eta$ and b^+ satisfies $(MC(\delta, R))$, we have

$$\sum_{y\in B(x,R)} (b^+ - 2Nb^-\chi_{B_{R_0}^c})(y)\mu_B(y) \geq (\delta - 2N\eta)\,\mu(B(x,R)) \tag{4.9}$$

for all x in V. If we choose $\eta > 0$ small enough, (4.9) implies that the potential $\tilde{b} = b^+ - 2Nb^-\chi_{B_{R_0}^c}$ satisfies the mean condition $MC(\frac{\delta}{2}, R)$. Then, the first condition of Theorem 4.3.6 is satisfied and we can conclude that $B(\lambda) = s(-\Delta + \lambda(b^+ - 2b^-\chi_{B_{R_0}^c})) > 0$ for all $\lambda \in (0, \epsilon)$ for some $\epsilon > 0$.

Now, we show that $A(\lambda) \geq 0$ for $\lambda > 0$ and small enough. Let $R_0' \geq R_0 + 1$ so that $B_{R_0} \subset B_{R_0'} \subset V$. Since $\mu(x) \geq \mu_{B_{R_0'}}(x)$ for all $x \in V$ and , we have

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\sum_{e\in E}|\nabla u(e)|^2\mu(e) + \lambda\sum_{x\in V} b^+(x)u(x)^2\mu(x) \geq \\
&\frac{1}{2}\sum_{e\in E_{B_{R_0'}}}|\nabla u(e)|^2\mu(e) + \lambda\sum_{x\in B_{R_0'}} b^+(x)u(x)^2\mu_{B_{R_0'}}(x).
\end{aligned}$$

Moreover, note that for all $x \in B_{R_0}$, we have $\mu(x) = \mu_{B_{R_0'}}(x)$ since $R_0' \geq R_0 + 1$. We also have $b^-(x)\chi_{B_{R_0}}(x) = 0$ for all $x \in B_{R_0}^c$. Then we can write

$$-\lambda\sum_{x\in V} 2b^-(x)\chi_{B_{R_0}}(x)u(x)^2\mu(x) \geq -\lambda\sum_{x\in B_{R_0'}} 2b^-(x)\chi_{B_{R_0}}(x)u(x)^2\mu_{B_{R_0'}}(x).$$

Finally, we find that

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{2}\sum_{e\in E}|\nabla u(e)|^2\mu(e)+\lambda\sum_{x\in V}(b^+-2b^-\chi_{B_{R_0}})u(x)^2\mu(x)\\
&\qquad\geq\frac{1}{2}\sum_{e\in B_{R_0'}}|\nabla u(e)|^2\mu(e)+\lambda\sum_{x\in B_{R_0'}}(b^+-2b^-\chi_{B_{R_0}})(x)u(x)^2\mu_{B_{R_0'}}(x)\\
&\qquad\geq s_{B_{R_0'}}(\lambda)\sum_{x\in B_{R_0'}}u(x)^2\mu_{B_{R_0'}}(x),
\end{aligned}$$

where $s_{B_{R_0'}}(\lambda)=\inf\sigma(H_{B_{R_0'}}(\lambda))$ with $H_{B_{R_0'}}(\lambda)=-\Delta_{B_{R_0'}}+\lambda(b^+-2b^-\chi_{B_{R_0}})$. To prove that $A(\lambda)\geq 0$, it is then sufficient to show that $s_{B_{R_0'}}(\lambda)\geq 0$ for $\lambda>0$ and small enough. Since the volume of the graph $G=(V,E)$ is infinite and b^+ satisfies the mean condition $(MC(\delta,R))$, we can choose R_0' large enough such that $\sum_{x\in B_{R_0'}}(b^+-2b^-\chi_{B_{R_0}})(x)\mu_{B_{R_0'}}(x)\geq\delta$. Mimeting the proof of Lemma 4.3.4 wa can conclude that $s_{B_{R_0'}}(\lambda)>0$ for all $\lambda>0$ and small enough.

To sum up, we have shown that $A(\lambda)\geq 0$ and $B(\lambda)>0$ for all $\lambda>0$ and small enough. We can then conclude that $s(\lambda)\geq\frac{1}{2}A(\lambda)+\frac{1}{2}B(\lambda)>0$ for all $\lambda>0$ and small enough. □

Note that when $G=\mathbb{Z}^d$, Theorem 4.3.6 remains valid without assuming that the negative part of the potential b^- vanishes at infinity. Indeed, in that case, the graph is very regular and we can be more precise in the covering of the space.See [Ak] for details.

3.4 Necessity of the mean condition.

In this section, we study the reverse ot Theorems 4.3.5 and 4.3.6. We have already seen that $s(-\Delta)$ could be strictly positive for some graphs and then the mean condition $(MC(\delta,R))$ is of course not necessary for $s(-\Delta+b)>0$ in the general case. However, the question is relevant for those graphs which satisfy $s(-\Delta)=0$. We recall that for any subset S of V, we note $\delta S=\{e=(x,y),x\in S,y\in V-S\}$ and $\mu(\delta S):=\sum_{e\in\delta S}\mu(e)$, $\mu(B(x,N))=\sum_{y\in B(x,N)}\mu(y)$. The Cheeger's constant of G is $h:=\inf_{S\subset V}\dfrac{\mu(\delta S)}{\mu(S)}$. Then we have $s(-\Delta)=0$ if and only if $h=0$. This is well-known is the unweighted case (see [DK]) and one can generalize it to weighted graphs. For example, any graph with sub-exponential growth (that is such that $\liminf_{r\to+\infty}(\mu(B(x_0,r)))^{1/r}=1$) satisfies $s(-\Delta)=0$.

We do not have an answer for the general case of graphs which satisfy $s(-\Delta)=h=0$. However, we can show that the mean condition $(MC(\delta,R))$ is necessary when the graph satisfies the following growth condition (GC) (which is stronger than the condition $h = 0$).

$$\inf_{N\in\mathbb{N}} \frac{\mu(\delta B(x,N))}{\mu(B(x,N))} = 0 \text{ for all } x \in V \tag{GC}$$

Theorem 4.3.7. *Assume that G satisfies (GC) and (UBD).Assume that the potential $b = b^+ - b^-$ is bounded.*

If $s(\lambda) > 0$ for some $\lambda > 0$, then the positive part b^+ of the potential satisfies the mean condition $(MC(\delta, R))$ for some $\delta > 0$.

Proof. Let us assume that b^+ does not satisfy the mean condition $(MC(\delta, R))$. We need to show that $s(-\Delta + \lambda b) \leq 0$ for all $\lambda \geq 0$. However, since $s(-\Delta + \lambda b) \leq s(-\Delta + \lambda b^+)$, we can suppose that the potential b is non-negative and then assume that b does not satisfy the mean condition $(MC(\delta, R))$.

Then, for all $\epsilon > 0$, for all N in $\mathbb{N} - \{0\}$, there exists $x_N \in V$ such that

$$\sum_{y\in B(x_N,N)} b(y)\mu_{B(x_N,N)}(y) \leq \epsilon\mu(B(x_N, N)).$$

Let $\chi_N := \chi_{B(x_N,N)}$ be the characteristic function of $B(x_N, N)$. Since $\mu_{B(x_N,N)}(x) = \mu(x)$ for all $x \in B(x_N, N-1)$, we have

$$\begin{aligned}
\langle H(\lambda)\chi_N, \chi_N\rangle_V &= \frac{1}{2}\sum_{e\in E} |\nabla\chi_N(e)|^2\mu(e) + \lambda \sum_{y\in B(x_N,N)} b(y)\mu(y) \\
&= \frac{1}{2}\sum_{e\in B(x_N,N+1)} |\nabla\chi_N(e)|^2\mu(e) + \lambda \sum_{y\in B(x_N,N)} b(y)\mu_{B(x_N,N)}(y) \\
&+ \lambda \sum_{y\in B(x_N,N)-B(x_N,N-1)} (\mu(y) - \mu_{B(x_N,N)}(y))b(y) \\
&\leq \frac{1}{2}\sum_{e\in B(x_N,N+1)} |\nabla\chi_N(e)|^2\mu(e) + \lambda\epsilon\mu(B(x_N, N)) \\
&+ \lambda||b||_\infty \sum_{y\in B(x_N,N)-B(x_N,N-1)} (\mu(y) - \mu_{B(x_N,N)}(y)).
\end{aligned}$$

For the last term, we have

$$\begin{aligned}
\sum_{y\in B(x_N,N)-B(x_N,N-1)} (\mu(y) - \mu_{B(x_N,N)}(y)) &= \sum_{y\in B(x_N,N)-B(x_N,N-1)} \Big(\sum_{z\sim y} \mu_{yz} - \sum_{\substack{z\sim y \\ z\in B(x_N,N)}} \mu_{yz}\Big) \\
&= \sum_{y\in B(x_N,N)-B(x_N,N-1)} \sum_{\substack{z\sim y \\ z\in V-B(x_N,N)}} \mu_{yz} \\
&= \sum_{e\in\delta B(x_N,N)} \mu(e) = \mu(\delta B(x_N, N)).
\end{aligned}$$

and we obtain for the first term

$$\sum_{e \in B(x_N, N+1)} |\nabla \chi_N(e)|^2 \mu(e) = \sum_{e \in \delta B(x_N, N)} \mu(e) = \mu(\delta B(x_N, N))$$

Finally, since $||\chi_N||_V^2 = \sum_{x \in B(x_N, N)} \mu(x) = \mu(B(x_N, N))$, we obtain

$$\begin{aligned} s(\lambda) &\leq \frac{\mu(\delta B(x_N, N))}{\mu(B(x_N, N))} + \frac{\lambda \epsilon \mu(B(x_N, N))}{\mu(B(x_N, N))} + \lambda \frac{\mu(\delta B(x_N, N))}{\mu(B(x_N, N))} \\ &\leq \lambda \epsilon + (1+\lambda) \frac{\mu(\delta B(x_N, N))}{\mu(B(x_N, N))}. \end{aligned}$$

Now the growth condition (GC) implies that $\frac{\mu(\delta B(x_N,N))}{\mu(B(x_N,N))} \underset{N \to +\infty}{\longrightarrow} 0$ and then then we have $s(\lambda) \leq (1+\lambda)\epsilon$ for N large enough. Since this relation is true for all $\epsilon > 0$, we finally find that $s(\lambda) \leq 0$ and the result follows.

□

Proposition 4.3.8. *If the graph G has sub-exponential growth, then G satisfies the growth condition (GC).*

Proof. Let us assume that G has sub-exponential growth, i.e $\liminf\limits_{r \to +\infty} \mu(B(x,r))^{1/r} = 1$ for any $x \in V$. If G does not satisfy the growth condition (GC), then there exist $\alpha > 0$ and $x \in V$ such that $\frac{\mu(\delta B(x,N))}{\mu(B(x,N))} \geq \alpha$ for all $N \in \mathbb{N}$. Let $B_N = B(x, N)$. We have

$$\mu(\delta B_N) \geq \alpha \mu(B_N) \geq \alpha \mu(B_{N-1}) \text{ for all } N \geq 1.$$

But $\mu(\delta B_N) = \sum_{x \in B_N - B_{N-1}} (\mu(x) - \mu_{B_N}(x)) \leq \sum_{x \in B_N - B_{N-1}} \mu(x) = \mu(B_N) - \mu(B_{N-1})$. Therefore $\mu(B_N) - \mu(B_{N-1}) \geq \alpha \mu(B_{N-1})$, that is

$$\mu(B_N) \geq (1+\alpha) \mu(B_{N-1}).$$

Iterating this relation yields $\mu(B_N) \geq (1+\alpha)^N \mu(B_0)$ and then

$$\liminf_{N \to +\infty} \mu(B_N)^{1/N} \geq 1 + \alpha > 1.$$

This is impossible since the graph has sub-exponential growth. □

For example, the unweighted graph $\mathbb{Z}^d$ has polynomial growth and thus satisfies this property.

4 The spectral functions for bipartite graphs

In this section, we consider bipartite graphs and we show how we can use the results established for the bottom of the spectrum $s(\lambda)$ to obtain similar ones on the top of the spectrum $M(\lambda) := \sup \sigma(H(\lambda))$.

We recall that a graph $G = (V, E)$ is bipartite if $V = V_0 \cup V_1$ with $V_0 \cap V_1 = \emptyset$ and $(x, y) \in E \Rightarrow (x \in V_0$ and $y \in V_1$ or $x \in V_1$ and $y \in V_0)$. We have the following property.

Proposition 4.4.1. *The following assertions are equivalent.*

1. *The graph $G = (V, E)$ is bipartite.*
2. *There exists a vertex $x_0 \in V$ such that $x \sim y \Rightarrow |d(x_0, x) - d(x_0, y)| = 1$.*
3. *The graph $G = (V, E)$ contains no odd-length cycles.*

Proof. 1. $\Rightarrow$ 2. Since $G = (V, E)$ is bipartite, we can write $V = V_0 \cup V_1$ with $V_0 \cap V_1 = \emptyset$ and $(x, y) \in E \Rightarrow x \in V_0$ and $y \in V_1$ or $x \in V_1$ and $y \in V_0$. Let us choose x_0 to be any point in V_0. Let $x, y \in V$ such that $x \sim y$. We can assume that $x \in V_0$ and $y \in V_1$. Then, we have $d(x_0, x)$ is an even number and $d(x_0, y)$ is an odd number. Then $|d(x_0, x) - d(x_0, y)|$ is an odd number. But $x \sim y$ implies that $|d(x_0, x) - d(x_0, y)| \in \{0, 1\}$ and then $|d(x_0, x) - d(x_0, y)| = 1$.
2. $\Rightarrow$ 1. Let x_0 be as in 2.. We define $V_0 := \{x \in V, d(x_0, x) \text{ is even,}\}$ and $V_1 := \{x \in V, d(x_0, x) \text{ is odd}\}$. It is clear that $V = V_0 \cup V_1$ and $V_0 \cap V_1 = \emptyset$. Let $x, y \in V_0$. Then, there exists $p, q \in \mathbb{N}$ such that $d(x_0, x) = 2p$ and $d(x_0, y) = 2q$. Let us assume that $x \sim y$. By assumption, we have $|d(x_0, x) - d(x_0, y)| = 1$ and then $|2p - 2q| = 1$ which is impossible. Choosing $x, y \in V_1$ leads to the same contradiction. Then, the graph G is bipartite.
1. $\Leftrightarrow$ 3. This is well known fact. $\square$

The following proposition and the operator U introduced in its proof are the keys of all the results of this section. This proposition appears in [KS] or in [DHKS] in the case of the discrete Schrödinger operator in Z^d (which is bipartite).

Proposition 4.4.2. *Let G be a bipartite weighted graph. We have for all $\lambda > 0$*

$$M(-\Delta + \lambda b) = 2 - s(-\Delta - \lambda b). \tag{4.10}$$

In particular, we have $M(-\Delta) = 2 - s(-\Delta)$ and then $M(-\Delta) = 2$ if and only if $s(-\Delta) = 0$.

Proof. Fix an origin x_0 and set $|x| := d(x_0, x)$ for $x \in V$. For ϕ in $\ell^2(V)$, we define the unitary operator U on $\ell^2(V)$ by $U\phi(x) = (-1)^{|x|}\phi(x)$. Since G is bipartite, Proposition 4.4.1 implies that $(-1)^{|y|} = (-1)^{|x|+1}$ for $x \sim y$. Then, we have

$$\begin{aligned} U(-\Delta)U\phi(x) &= U\left[(-1)^{|x|}\phi(x) - \frac{1}{\mu(x)}\sum_{y\sim x}\underbrace{(-1)^{|y|}}_{=(-1)^{|x|+1}}\phi(y)\mu_{xy}\right] \\ &= U\left[(-1)^{|x|}(\phi(x) + \frac{1}{\mu(x)}\sum_{y\sim x}\phi(y)\mu_{xy})\right] \\ &= \phi(x) + \frac{1}{\mu(x)}\sum_{y\sim x}\phi(y)\mu_{xy} = 2\phi(x) - (\phi(x) - \frac{1}{\mu(x)}\sum_{y\sim x}\phi(y)\mu_{xy}). \end{aligned}$$

Therefore, we have $U(-\Delta)U = 2I + \Delta$. Moreover, it is clear that $UbU = b$ and then $U(-\Delta + \lambda b)U = 2I + \Delta + \lambda b = 2I - (-\Delta - \lambda b)$. Since U is unitary, this equality clearly implies relation (4.10). $\square$

4.1 The top of the spectrum for bipartite graphs

Using relation (4.10) from Proposition 4.4.2, one can easily deduce from Theorem 4.3.6 and Theorem 4.3.7 the following result for $M(\lambda)$.

Theorem 4.4.3. *Let G be a bipartite weighted graph. Assume that G satisfies (GC), (UBD) and $(UBE(R))$ for some $R > 0$. Let $b = b^+ - b^-$ be a bounded potential such that b^+ vanishes at infinity. Then, the following assertions are equivalent.*

(1) *$M(\lambda) < 2$ for all $\lambda \in (0, \epsilon)$, for some $\epsilon > 0$.*

(2) *the negative part b^- of the potential satisfies $(MC(\delta, R))$ for some $\delta > 0$.*

In particular, if $b = -b^-$ is a negative potential then, the following assertions are equivalent.

(1′) *$M(\lambda) < 2$ for all $\lambda > 0$.*

(2′) *b^- satisfies $(MC(\delta, R))$ for some $\delta > 0$.*

Another consequence of Theorem 4.3.6 is that the condition $(MC(\delta, R))$ assures that the operator $H(\lambda)$ has spectrum over 2.

Theorem 4.4.4. *Let G be a bipartite weighted graph. Assume that G satisfies (GC), (UBD) and $(UBE(R))$ for some $R > 0$. Let $b = b^+ - b^-$ be a potential such that b^- vanishes at infinity.*

If the potential b^+ satisfies $(MC(\delta, R))$ for some $\delta > 0$, then $M(\lambda) > 2$ for all $\lambda > 0$.

Proof. Since the potential b satisfies the assumptions of Theorem 4.3.6, there exists $\epsilon > 0$ such that $s(\lambda) > 0$ for all $\lambda \in (0, \epsilon)$. Moreover, the condition (GC) implies that $s(0) = 0$. Now, using the fact that $s(\lambda)$ is a concave function as the infimum of affine functions, we conclude that $s(\lambda) < 0$ for all $\lambda < 0$. The result follows from relation (4.10) : $M(\lambda) = 2 - s(-\lambda) > 2$ for all $\lambda > 0$. $\square$

Let us summarize our results in the following section.

4.2 The spectral functions for bipartite graphs

In this section, we describe the behaviour of the spectral functions $s(\lambda) := s(-\Delta+\lambda b)$ and $M(\lambda) := M(-\Delta+\lambda b)$. We will assume that the graph G is bipartite and satisfies (GC), (UBD) and $(UBE(R))$ for some $R>0$, since we have found necessary and sufficient conditions in that case. Fisrt, we recall some well known facts.

1. The growth condition (GC) implies that $s(0)=0$ and then $M(0)=2$ using relation (4.10).
2. $s(\lambda)$ is a concave function as the infimum of affine functions and $M(\lambda)$ is a convex function as the supremum of affine functions.
3. If $b^+ \not\equiv 0$, then $M(\lambda) \underset{\lambda\to+\infty}{\longrightarrow} +\infty$ and if $b^- \not\equiv 0$, then $s(\lambda) \underset{\lambda\to+\infty}{\longrightarrow} -\infty$.

When the potential b is non-negative, $M(\lambda)$ and $s(\lambda)$ are increasing functions. Indeed, in that case, we have $M(0)=2$ and $M(\lambda)\geq 2$ for all $\lambda\geq 0$ and $s(0)=0$ and $s(\lambda)\geq 0$ for all $\lambda \geq 0$. Then by convexity, they are increasing functions. When b may change sign, our results stand for potentials b for which b^- vanishes at infinity. Figure 4.1 below illustrates our Theorems.

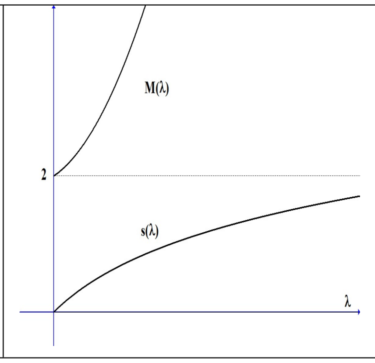
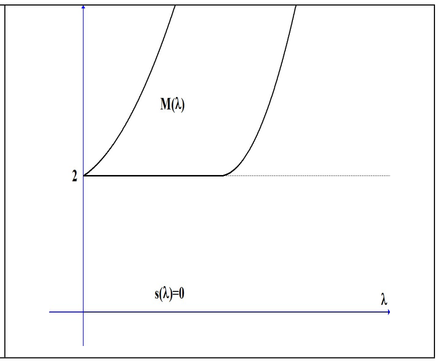
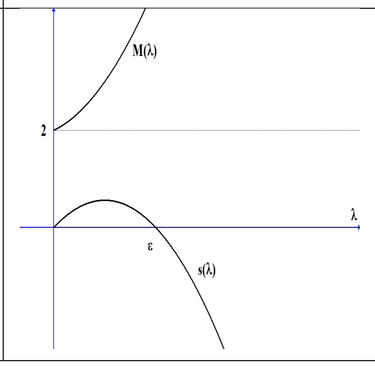
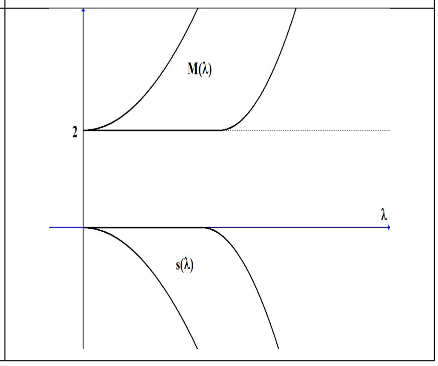
$b \geq 0$	b satisfies$(MC(\delta,R))$	b doesn't satisfy$(MC(\delta,R))$
		
$b=b^+-b^-$ and $b^-\to 0$	b^+ satisfies$(MC(\delta,R))$	b^+ doesn't satisfy$(MC(\delta,R))$
		

FIGURE 4.1 – The spectral functions.

4.3 The absence of bound states for recurrent bipartite graphs

In this section, we prove Theorem 4.1.2 which states that on recurrent bipartite graphs, the only Schrödinger operator which satisfies $\sigma(H) \subset [0,2]$ is the Laplacian $H = -\Delta$. This result is due to Damanik et al. in [DHKS] when $G = (\mathbb{Z}^d)$ for $d = 1$ or $d = 2$ (a different proof is provided in [Ak]. Theorem 4.1.2 generalizes this result since it is well-known that the graph $\mathbb{Z}^d$ is recurrent if and only if $d \leq 2$ (see [Wo]). The key point in the proofs in [DHKS] and [Ak] is the existence of sequences $\phi_p \in \ell^2(\mathbb{Z}^d)$ such that $\phi_p(n) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 1$ for all $n \in \mathbb{Z}^d$ and $\langle -\Delta\phi_p, \phi_p\rangle \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0$. In dimensions one and two, one can provide explicit sequences with these properties (see Proposition 4.3 and 4.4 in [DHKS]). A similar property stands for recurrent graphs as stated in Proposition 4.4.5. We say that the weighted graph (G,μ) is recurrent if the random walk (or the Markov chain) on (G,μ) is recurrent (see [Wo] for details and Definition 1.14 in particular). The following proposition is a direct consequence of Theorem 2.12 in [Wo].

Proposition 4.4.5. *Let $G = (V, E, \mu)$ be a bipartite weighted graph. We assume that G is recurrent. Then, there exists a sequence of functions $(\phi_p)_{p\in\mathbb{N}}$ in $\ell^2(V)$ such that*

$$\begin{cases} \phi_p(x) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 1 \text{ for all } x \in V, \\ \langle \nabla\phi_p, \nabla\phi_p\rangle_{\tilde{E}} \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0. \end{cases} \tag{4.11}$$

Note that when the weighted graph $G = (V, E, \mu)$ is bipartite and recurrent, we have $s(-\Delta) = 0$ and then $M(-\Delta) = 2$ according to Proposition 4.4.2. Following an idea from [KS] (Proposition 10.10), the next proposition shows how we can find spectrum outside $[0,2]$.

Proposition 4.4.6. *Let (G,μ) be a bipartite weighted graph. We assume that G is recurrent and let $(\phi_p)_{p\in\mathbb{N}}$ be a sequence satisfying (4.11) as in Proposition 4.4.5.*

Let $A(\phi_p) := \langle b\phi_p, \phi_p\rangle = \sum_{x\in V} b(x)\phi_p(x)^2\mu(x)$. We have

1. *If $\liminf_{p\to+\infty} A(\phi_p) < 0$, then H has spectrum in $(-\infty, 0)$.*

2. *If $\limsup_{p\to+\infty} A(\phi_p) > 0$, then H has spectrum in $(2, +\infty)$.*

Proof. We have

$$\langle H\phi_p, \phi_p\rangle = \langle \nabla\phi_p, \nabla\phi_p\rangle + \langle b\phi_p, \phi_p\rangle = \langle \nabla\phi_p, \nabla\phi_p\rangle + A(\phi_p).$$

If $\liminf_{p\to+\infty} A(\phi_p) < 0$, then there exist $\epsilon > 0$ and $p_0 > 0$ such that for all $p \geq p_0$, $A(\phi_p) \leq -\epsilon$. Since $(\phi_p)_{p\in\mathbb{N}}$ satisfies (4.11), then there exists $p_1 > 0$ such that for all $p \geq p_1$, $\langle \nabla\phi_p, \nabla\phi_p\rangle \leq \frac{\epsilon}{2}$. For $q = \max(p_0, p_1)$, we obtain $\frac{\langle H\phi_q,\phi_q\rangle}{||\phi_q||^2} \leq \frac{\epsilon}{2||\phi_q||^2} - \frac{\epsilon}{||\phi_q||^2} =$

$-\frac{\epsilon}{2||\phi_q||^2} < 0$. The min-max principle implies that $s(H) < 0$ and then that H has spectrum in $(-\infty, 0)$.

Using the unitary operator U on $\ell^2(V)$ given by $U\phi(x) = (-1)^{|x|}\phi(x)$ and the same reasonment as above, we find that H has spectrum in $(2, +\infty)$ if $\limsup\limits_{p\to+\infty} A(\phi_p) > 0$. $\square$

Theorem 4.4.7. *Let (G, μ) be a bipartite weighted graph. We assume that G is recurrent. Let $b \not\equiv 0$ be a non-trivial potential.*

If $s(H) \geq 0$, then $M(H) > 2$.

Proof. Let $(\phi_p)_{p\in\mathbb{N}}$ satisfy (4.11) as in Proposition 4.4.5. The assumption $s(H) \geq 0$ means that H has no spectrum in $(-\infty, 0)$. Using Proposition 4.4.6, we conclude that $\liminf\limits_{p\to+\infty} A(\phi_p) \geq 0$ which implies that $\limsup\limits_{p\to+\infty} A(\phi_p) \geq 0$.

If $\limsup\limits_{p\to+\infty} A(\phi_p) > 0$, we use the second assertion of Proposition 4.4.6 and we conclude that H has spectrum in $(2, +\infty)$ and then $M(H) > 2$.

If $\limsup\limits_{p\to+\infty} A(\phi_p) = 0$, then $\liminf\limits_{p\to+\infty} A(\phi_p) = 0$ and $\lim\limits_{p\to+\infty} A(\phi_p)$ exists and equals zero. We will now prove that this situation cannot happen. Let us then suppose that $\lim\limits_{p\to+\infty} A(\phi_p) = 0$.

Since b is bounded, we can define the bilinear form h on $\ell^2(V)$ associated with H. For $u, v \in \ell^2(V)$, $h(u, v) = \langle \nabla u, \nabla v\rangle_{\tilde{E}} + \langle bu, v\rangle_V$. Since $(\phi_p)_{p\in\mathbb{N}}$ satisfies property (4.11) and $\lim\limits_{p\to+\infty} A(\phi_p) = \lim\limits_{p\to+\infty} \langle b\phi_p, \phi_p\rangle = 0$, we have

$$h(\phi_p, \phi_p) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0.$$

Now, the fact that $s(H) \geq 0$ assures that the bilinear form h is non-negative. Hence, by Cauchy-Schwarz inequality

$$|h(\phi_p, v)|^2 \leq h(\phi_p, \phi_p) h(v, v) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0,$$

for all $v \in \ell^2(V)$.

In particular, we have

$$h(\phi_p, v) = \langle \nabla\phi_p, \nabla v\rangle_{\tilde{E}} + \langle b\phi_p, v\rangle_V \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0. \tag{4.12}$$

But, using Cauchy-Schwarz inequality again and (4.11), we find that

$$\langle \nabla\phi_p, \nabla v\rangle_{\tilde{E}}^2 \leq \langle \nabla\phi_p, \nabla\phi_p\rangle \langle \nabla v, \nabla v\rangle \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0. \tag{4.13}$$

We deduce from (4.12) and (4.13) that for all $v \in \ell^2(V)$, we have

$$\langle b\phi_p, v\rangle = \sum_{x\in V} b(x)\phi_p(x)v(x)\mu(x) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0.$$

But, since $\phi_p(y) \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 1$ for all $y \in V$, we cannot have $\langle b\phi_p, v\rangle \underset{p\to+\infty}{\longrightarrow} 0$ for all $v \in \ell^2(V)$. $\square$

5 Asymptotic behavior of the spectral function

Let G be a weighted graph on which we make no particular assumptions. For a non-negative potential b, we consider the Schrödinger operator $H(\lambda) = -\Delta + \lambda b$ and we note $s(\lambda)$ the bottom of its spectrum. The spectral function $s(\lambda)$ is a concave non-negative function and then it is non-decreasing. Therefore, $s(\infty) := \lim_{\lambda\to+\infty} s(\lambda)$ exists in $\mathbb{R}_+ \cup \{+\infty\}$. The aim of this section is to study this limit.

The following Proposition establishes when the limit $s(\infty)$ is finite.

Proposition 4.5.1. *We have* $s(\infty) := \lim_{\lambda\to+\infty} s(\lambda) < +\infty$ *if and only if* $\inf_{x\in V} b(x) = 0$.

Proof. First, we assume that $\inf_{x\in V} b(x) = 0$. Let $\lambda > 0$ and $\epsilon > 0$. Since $\inf_{x\in V} b(x) = 0$, there exists $x_0 \in V$ such that $\lambda b(x_0) \leq \epsilon$. Let $u_{x_0} \in \ell^2(V)$ such that $u_{x_0}(x) = \delta_{x,x_0}$. We have

$$\langle H(\lambda)u_{x_0}, u_{x_0}\rangle_V = \langle \nabla u_{x_0}, \nabla u_{x_0}\rangle_{\tilde{E}} + \lambda \langle b u_{x_0}, u_{x_0}\rangle_V = \mu(x_0) + \lambda b(x_0)\mu(x_0) \leq \mu(x_0)(1+\epsilon).$$

But $\langle u_{x_0}, u_{x_0}\rangle_V = \mu(x_0)$ and then $s(\lambda) \leq 1+\epsilon$. Since this relation is true for all $\lambda > 0$ and for all $\epsilon > 0$, we obtain $s(\infty) \leq 1 < +\infty$.

Now, we assume that $\inf_{x\in V} b(x) = \beta > 0$, then it is clear that $s(\lambda) \geq \lambda\beta \underset{\lambda\to+\infty}{\longrightarrow} +\infty$. $\square$

When $s(\infty)$ is finite, we are interested in its value. To this aim, we need some preliminary result. For a subset Ω of V, not necessarily connected, Proposition 4.5.2 establishes a Green type formula for the Dirichlet Laplacian $-\Delta_\Omega^D$. See Section 2 for definitions and notations.

Proposition 4.5.2. *For all* $u : \Omega^* \to \mathbb{R}$, *we define* $\tilde{u} : \Omega^* \to \mathbb{R}$ *such that* $\tilde{u}(x) = u(x)$ *for* $x \in \Omega$ *and* $\tilde{u}(x) = 0$ *for* $x \in \delta\Omega$. *We have for all* $u, v : \Omega^* \to \mathbb{R}$

$$\langle \nabla_{\Omega^*} u, \nabla_{\Omega^*} v\rangle_{\tilde{E_{\Omega^*}}} = \left\langle \tilde{u}, -\Delta_\Omega^D \tilde{v}\right\rangle_{\Omega^*} - \sum_{x\in\delta\Omega} \sum_{\substack{y\sim x\\ y\in\Omega}} u(y)v(x)\mu_{xy} + \sum_{x\in\delta\Omega} \sum_{\substack{y\sim x\\ y\in\Omega^*}} u(x)(v(x)-v(y))\mu_{xy}.$$

Proof. We have seen in the preliminary section that $d_{\Omega^*}^* d_{\Omega^*} = -\Delta_{\Omega^*}$. Using this relation, we obtain

$$\begin{aligned}\langle \nabla_{\Omega^*}u, \nabla_{\Omega^*}v\rangle_{E_{\Omega^*}^{\sim}} &= \langle u, -\Delta_{\Omega^*}v\rangle_{\Omega^*} = \sum_{x\in\Omega^*} u(x) \sum_{\substack{y\sim x\\ y\in\Omega^*}} (v(x)-v(y))\mu_{xy}\\ &= \sum_{x\in\Omega} u(x) \sum_{\substack{y\sim x\\ y\in\Omega^*}} (v(x)-v(y))\mu_{xy} + \sum_{x\in\delta\Omega} u(x) \sum_{\substack{y\sim x\\ y\in\Omega^*}} (v(x)-v(y))\mu_{xy}.\end{aligned}$$

By definition on $\tilde{u}$, we have

$$\sum_{x\in\Omega} u(x) \sum_{\substack{y\sim x\\ y\in\Omega^*}} (v(x)-v(y))\mu_{xy} = \underbrace{\sum_{x\in\Omega} u(x) \sum_{y\in\Omega^*, y\sim x} (\tilde{v}(x)-\tilde{v}(y))\mu_{xy}}_{(1)} - \underbrace{\sum_{x\in\Omega} u(x) \sum_{y\in\delta\Omega, y\sim x} v(y)\mu_{xy}}_{(2)}.$$

Since $\tilde{v}$ is in the domain of $-\Delta_\Omega^D$, we can use this operator to compute (1). Indeed, by definition, we have $\sum\limits_{y\in\Omega^*, y\sim x} (\tilde{v}(x)-\tilde{v}(y))\mu_{xy} = \mu_{\Omega^*}(x)(-\Delta\tilde{v})(x) = \mu_{\Omega^*}(x)(-\Delta_\Omega^D\tilde{v})(x)$ for $x\in\Omega$ and $(-\Delta_\Omega^D\tilde{v})(x) = 0$ for $x\in\delta\Omega$. Then, we obtain

$$(1) = \sum_{x\in\Omega^*} u(x)(-\Delta_\Omega^D\tilde{v})(x)\mu_{\Omega^*}(x) = \left\langle \tilde{u}, -\Delta_\Omega^D\tilde{v}\right\rangle_{\Omega^*},$$

and

$$(2) = \sum_{x\in\Omega} u(x) \sum_{y\in\delta\Omega, y\sim x} v(y)\mu_{xy} = \sum_{y\in\delta\Omega}\sum_{x\in\Omega, x\sim y} u(x)v(y)\mu_{xy} = \sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{y\in\Omega, y\sim x} u(y)v(x)\mu_{xy}.$$

The result follows putting all these terms together. □

Before we give the result, we recall that for a non-empty subset S of V, the Laplacian with Dirichlet boundary condition $-\Delta_S^D$ is defined in Section 2. Moreover, the bottom of the spectrum of $-\Delta_S^D$ is given by the Min-Max principle as

$$s(-\Delta_S^D) = \inf_{\substack{f\in\ell^2(S^*)\\ f\sim\ (DBC)}} \frac{\left\langle -\Delta_S^D f, f\right\rangle_{S^*}}{\langle f, f\rangle_{S^*}}.$$

In the following sections, we prove that $s(\infty)$ is related to $s(-\Delta_S^D)$ for a certain domain S where the potential b in small in a sense. For example, when b is null on a domain Ω and bounded from below on $\mathbb{Z}-\Omega$, we will see that $s(\infty) = s(-\Delta_\Omega^D)$. We treat this particular case in the following section.

5.1 A particular case

In the continuous case, W. Arendt and C. Batty show in [AB2] that for a non-negative potential V which satisfies $\lim\inf\limits_{|x|\to\infty} V(x) > 0$, $s(\infty)$ equals the bottom of the spectrum of the Dirichlet Laplacian on the domain where V is null. They show and use the existence of principal eigenvalues and eigenvectors of the Schrödingeroperator for large values of λ.

In the graph setting, our proof is different but we manage to show a similar result using the formula proved in the previous section.

Theorem 4.5.3. *Let b be a non-negative potential such that $b = 0$ on a non-empty set Ω and $b \geq \beta > 0$ on $V - \Omega$. Then we have*

$$s(\infty) := \lim_{\lambda \to +\infty} s(\lambda) = s(-\Delta_\Omega^D).$$

Proof. We first show that $s(\infty) \leq s(-\Delta_\Omega^D)$. Let $n \in \mathbb{N} - \{0\}$. By definition of $s(-\Delta_\Omega^D)$, there exists $u_n \in \ell^2(\Omega^*)$, with $||u_n||^2_{\Omega^*} = 1$, such that $u_n(x) = 0$ for all $x \in \delta\Omega$ and $\left\langle -\Delta_\Omega^D u_n, u_n \right\rangle_{\Omega^*} \leq s(-\Delta_\Omega^D) + \frac{1}{n}$. Let us define $\hat{u}_n \in \ell^2(V)$ by $\hat{u}_n(x) = u_n(x)$ for all $x \in \Omega^*$ and $\hat{u}_n(x) = 0$ for all $x \in V - \Omega^*$. By definition of $-\Delta_\Omega^D$, we have $\langle -\Delta \hat{u}_n, \hat{u}_n \rangle_V = \left\langle -\Delta_\Omega^D u_n, u_n \right\rangle_{\Omega^*} \leq s(-\Delta_\Omega^D) + \frac{1}{n}$. Then, we have

$$\begin{aligned}
\langle H(\lambda)\hat{u}_n, \hat{u}_n \rangle_V &= \langle -\Delta \hat{u}_n, \hat{u}_n \rangle_V + \lambda \langle b\hat{u}_n, \hat{u}_n \rangle_V \\
&= \left\langle -\Delta_\Omega^D u_n, u_n \right\rangle_{\Omega^*} + \lambda \sum_{x \in \Omega} \underbrace{b(x)}_{=0} \hat{u}_n(x)^2 \mu(x) + \lambda \sum_{x \in V - \Omega} b(x) \underbrace{\hat{u}_n(x)^2}_{=0} \mu(x) \\
&= \left\langle -\Delta_\Omega^D u_n, u_n \right\rangle_{\Omega^*} \leq s(-\Delta_\Omega^D) + \frac{1}{n}.
\end{aligned}$$

Since this relation is true for all $\lambda > 0$ and for all $n \geq 1$, we obtain $s(\infty) \leq s(-\Delta_\Omega^D)$.

Now, we show that $s(\infty) \geq s(-\Delta_\Omega^D)$. To this aim, we introduce the following sets, for $\eta > 0$ to be choosen later.

$$A_\eta := \left\{ u \in \ell^2(V, \mu), \; ||u||_V = 1, \; \sum_{x \in V - \Omega} u(x)^2 \mu(x) > \eta^2 \right\},$$

$$B_\eta := \left\{ u \in \ell^2(V, \mu), \; ||u||_V = 1, \; \sum_{x \in V - \Omega} u(x)^2 \mu(x) \leq \eta^2 \right\},$$

so that

$$A_\eta \cup B_\eta = \left\{ u \in \ell^2(V, \mu), \; ||u||_V = 1 \right\}.$$

This relation clearly implies that

$$s(\lambda) := \inf_{||u||=1, u \in \ell^2(V,\mu)} \langle H(\lambda)u, u \rangle = \min(\inf_{u \in A_\eta} \langle H(\lambda)u, u \rangle, \inf_{u \in B_\eta} \langle H(\lambda)u, u \rangle).$$

We can then study each case separately.

Let us first treat the case where u is in A_η. Since the potential b is non-negative and uniformly bounded from below by β on $V-\Omega$, we have

$$\begin{aligned}\langle H(\lambda)u,u\rangle_V &= \langle \nabla u,\nabla u\rangle_{\tilde{E}} + \lambda\langle bu,u\rangle_V \geq \lambda\langle bu,u\rangle_V = \lambda\sum_{x\in V} b(x)u(x)^2\mu(x)\\ &\geq \lambda\sum_{x\in V-\Omega} b(x)u(x)^2\mu(x) \geq \lambda\beta\sum_{x\in V-\Omega} u(x)^2\mu(x) \geq \lambda\beta\eta^2.\end{aligned}$$

Since this relation is true for all $u\in A_\eta$, we have for all $\lambda>0$

$$\inf_{u\in A_\eta}\langle H(\lambda)u,u\rangle_V \geq \lambda\beta\eta^2. \tag{4.14}$$

Let us now assume that u is in B_η. Since the potential b is non-negative and $E_{\Omega^*}\subset E$, we have

$$\langle H(\lambda)u,u\rangle_V = \langle \nabla u,\nabla u\rangle_E + \lambda\langle bu,u\rangle_V \geq \langle \nabla u,\nabla u\rangle_{E_{\Omega^*}} = \langle \nabla_{\Omega^*}u,\nabla_{\Omega^*}u\rangle_{E_{\Omega^*}}.$$

Now, we use the formula established in Proposition 4.5.2

$$\langle \nabla_{\Omega^*}u,\nabla_{\Omega^*}v\rangle_{\tilde{E_{\Omega^*}}} = \left\langle \tilde{u},-\Delta_\Omega^D\tilde{v}\right\rangle_{\Omega^*} - \sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{\substack{y\sim x\\ y\in\Omega}} u(y)v(x)\mu_{xy} + \sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{\substack{y\sim x\\ y\in\Omega^*}} u(x)(v(x)-v(y))\mu_{xy},$$

where $\tilde{u}$ is defined in Proposition 4.5.2. For $v=u$, we find

$$||\nabla_{\Omega^*}u||_{\tilde{E_{\Omega^*}}} = \left\langle \tilde{u},-\Delta_\Omega^D\tilde{u}\right\rangle_{\Omega^*} + \sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{\substack{y\sim x\\ y\in\Omega^*}} u(x)^2 - \sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{\substack{y\sim x\\ y\in\Omega}} 2u(y)u(x)\mu_{xy} - \sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{\substack{y\sim x\\ y\in\delta\Omega}} u(y)u(x)\mu_{xy}$$

and ignoring the second term which is non-negative, we obtain

$$\langle H(\lambda)u,u\rangle_V \geq \left\langle \tilde{u},-\Delta_\Omega^D\tilde{u}\right\rangle_{\Omega^*} - \sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{y\in\Omega,y\sim x} 2u(y)u(x)\mu_{xy} - \sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{y\in\delta\Omega,y\sim x} u(y)u(x)\mu_{xy}.$$

Since $\tilde{u}$ is in the domain of $-\Delta_\Omega^D$, the first term satisfies

$$\left\langle \tilde{u},-\Delta_\Omega^D\tilde{u}\right\rangle_{\Omega^*} \geq s(-\Delta_\Omega^D)||\tilde{u}||^2_{\Omega^*} \geq s(-\Delta_\Omega^D)(1-\eta^2). \tag{i}$$

Indeed, since $\mu_{\Omega^*}(x)=\mu(x)$ for all $x\in\Omega$ and u is in B_η, we have

$$||\tilde{u}||^2_{\Omega^*} = \sum_{x\in\Omega^*}\tilde{u}(x)^2\mu_{\Omega^*}(x) = \sum_{x\in\Omega} u(x)^2\mu_{\Omega^*}(x) = \sum_{x\in\Omega} u(x)^2\mu(x) \geq 1-\eta^2.$$

Moreover, we can estimate the second term using the relation $2u(x)u(y)\leq \frac{u(x)^2}{\alpha} + \alpha u(y)^2$, valid for all $\alpha>0$. We obtain

$$-\sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{y\in\Omega,y\sim x} 2u(y)u(x)\mu_{xy} \geq -\sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{y\in\Omega,y\sim x}\frac{u(x)^2}{\alpha}\mu_{xy} - \sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{y\in\Omega,y\sim x}\alpha u(y)^2\mu_{xy}.$$

But we have $\sum_{y\in\Omega, y\sim x}\mu_{xy} \le \mu(x)$, and then

$$-\sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{y\in\Omega,y\sim x} 2u(y)u(x)\mu_{xy} \ge -\sum_{x\in\delta\Omega}\frac{u(x)^2}{\alpha}\mu(x) - \sum_{y\in\Omega}\sum_{x\in\delta\Omega,x\sim y}\alpha u(y)^2\mu_{xy}$$
$$\ge -\frac{1}{\alpha}\sum_{x\in V-\Omega} u(x)^2\mu(x) - \alpha\sum_{y\in\Omega} u(y)^2\mu(y).$$

Now, using the fact that $u \in B_\eta$ and $\sum_{y\in\Omega} u(y)^2\mu(y) \le \sum_{y\in V} u(y)^2\mu(y) = 1$, we finally find

$$-\sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{y\in\Omega,y\sim x} 2u(y)u(x)\mu_{xy} \ge -\frac{\eta^2}{\alpha} - \alpha. \qquad (ii)$$

For the last term, the same technic with $\alpha = 1$ leads to the relation

$$-\sum_{x\in\delta\Omega}\sum_{y\in\delta\Omega,y\sim x} u(y)u(x)\mu_{xy} \ge -\eta^2. \qquad (iii)$$

Putting together relations (i), (ii) and (iii), we find for all $\alpha > 0$ and all u in B_η

$$\langle H(\lambda)u, u\rangle_V \ge s(-\Delta_\Omega^D)(1-\eta^2) - \frac{\eta^2}{\alpha} - \alpha - \eta^2.$$

Now, if we choose $\alpha = \eta$, we obtain for all $\lambda > 0$

$$\inf_{u\in B_\eta}\langle H(\lambda)u, u\rangle_V \ge s(-\Delta_\Omega^D) - 2\eta - \eta^2(1 + s(-\Delta_\Omega^D)). \qquad (4.15)$$

Now, we fix an $\epsilon > 0$ and we show that there exists λ_ϵ such that for all $\lambda \ge \lambda_\epsilon$, we have $s(\lambda) \ge s(-\Delta_\Omega^D) - \epsilon$. This will prove that $s(\infty) := \lim\limits_{\lambda\to+\infty} s(\lambda) \ge s(-\Delta_\Omega^D)$.

For $\eta = \eta_\epsilon$ small enough, relation (4.15) becomes for all $\lambda > 0$

$$\inf_{u\in B_{\eta_\epsilon}}\langle H(\lambda)u, u\rangle_V \ge s(-\Delta_\Omega^D) - \epsilon.$$

We fix such an η_ϵ and we return to relation (4.14) : $\inf\limits_{u\in A_{\eta_\epsilon}}\langle H(\lambda)u, u\rangle_V \ge \lambda\beta\eta_\epsilon^2 \underset{\lambda\to+\infty}{\longrightarrow} +\infty$. Therefore, there exists $\lambda_\epsilon > 0$ such that for all $\lambda \ge \lambda_\epsilon$, we have

$$\inf_{u\in A_{\eta_\epsilon}}\langle H(\lambda)u, u\rangle_V \ge s(-\Delta_\Omega^D) - \epsilon.$$

Finally, for all $\lambda \ge \lambda_\epsilon$, we have

$$s(\lambda) := \inf_{\substack{||u||=1\\ u\in\ell^2(V,\mu)}}\langle H(\lambda)u, u\rangle = \min(\inf_{u\in A_{\eta_\epsilon}}\langle H(\lambda)u, u\rangle\, , \inf_{u\in B_{\eta_\epsilon}}\langle H(\lambda)u, u\rangle) \ge s(-\Delta_\Omega^D) - \epsilon.$$

This relation proves that $s(\infty) \ge s(-\Delta_\Omega^D)$ and completes the proof.

□

5.2 The general case

Now, we deal with the general case.

Theorem 4.5.4. *Let b be a non-negative potential such that $\inf\limits_{x\in V} b(x) = 0$. For $n \in \mathbb{N}$, we define the set $\Omega_n := \left\{x \in V,\, b(x) \leq \frac{1}{n}\right\}$. Then the sequence $(s(-\Delta^D_{\Omega_n}))_{n\geq 1}$ is convergent and we have*

$$s(\infty) := \lim_{\lambda\to+\infty} s(\lambda) = \lim_{n\to\infty} s(-\Delta^D_{\Omega_n}).$$

Proof. We will write s_{Ω_n} for $s(-\Delta^D_{\Omega_n})$. First, we prove that the sequence $(s_{\Omega_n})_{n\geq1}$ is convergent. It is clear that $\Omega_m \subset \Omega_n$ for $m > n$ and then the min-max principle implies that $s_{\Omega_m} \geq s_{\Omega_n}$ for $m > n$. Therefore, the sequence $(s_{\Omega_n})_{n\geq1}$ is increasing. Moreover, for any non-empty subset $S \subset V$, we have $s(-\Delta^D_S) \leq 1$. Indeed, for $y \in S$, if we define $u_y(x) = \delta_{x,y}$, we have, $\left\langle -\Delta^D_S u_y, u_y\right\rangle = \sum_{x\in S^*} u_y(x)(\sum_{z\in S^*, z\sim x}(u_y(x) - u_y(z))) = \sum_{z\in S^*, z\sim x} 1 = \mu_{S^*}(x) = ||u_y||^2_{S^*}$ which shows that $s(-\Delta^D_S) \leq 1$. The assumption $\inf\limits_{x\in V} b(x) = 0$ implies that $\Omega_n \neq \emptyset$ and then $s_{\Omega_n} \leq 1$ for all $n \geq 1$. The sequence $(s_{\Omega_n})_{n\geq1}$ is bounded and increasing then it is convergent.

Let us show that $s(\infty) \geq \lim\limits_{n\to\infty} s_{\Omega_n}$. We define the potential b_n by $b_n(x) = 0$ if $x \in \Omega_n$ and $b_n(x) = b(x) > \frac{1}{n}$ if $x \notin \Omega_n$. We note $H_n(\lambda)$ the Schrödinger operator with the non-negative potential b_n and $s_n(\infty) := \lim\limits_{\lambda\to+\infty} s(H_n(\lambda))$. Since b_n satisfies the assumptions of Theorem 4.5.3 with $\beta = \frac{1}{n}$, we can conclude that $s_n(\infty) = s_{\Omega_n}$. Moreover, by construction, we have $H(\lambda) \geq H_n(\lambda)$ and then $s(\lambda) \geq s(H_n(\lambda))$ for all $\lambda > 0$. Since the limit when λ goes to $+\infty$ is finite for both sides of this inequality, we have $s(\infty) \geq s_n(\infty) = s_{\Omega_n}$ for all $n \geq 1$. Taking the limit when n goes to infinity, we finally obtain $s(\infty) \geq \lim\limits_{n\to\infty} s_{\Omega_n}$.

Let us now prove that $s(\infty) \leq \lim\limits_{n\to\infty} s_{\Omega_n}$. Let $\epsilon > 0$ and $\lambda > 0$ be fixed. There exists $n_0 \geq 1$ such that $\frac{\lambda}{n_0} < \frac{\epsilon}{2}$. Let us consider the set Ω_{n_0}. By definition of $s_{\Omega_{n_0}}$, we can find a function $u_{n_0} \in \ell^2(\Omega^*_{n_0})$, with $||u_{n_0}||^2_{\Omega^*_{n_0}} = 1$, such that $u_{n_0}(x) = 0$ for all $x \in \partial\Omega_{n_0}$ and $\left\langle -\Delta^D_{\Omega_{n_0}} u_{n_0}, u_{n_0}\right\rangle_{\Omega^*_{n_0}} \leq s(\Omega_{n_0}) + \frac{\epsilon}{2}$. Let us define the function $\hat{u}_{n_0}$ on $\ell^2(V)$ by $\hat{u}_{n_0}(x) = u_{n_0}(x)$ for all $x \in \Omega^*_{n_0}$ and $\hat{u}_{n_0}(x) = 0$ for all $x \in V - \Omega^*_{n_0}$. By definition of $-\Delta^D_{\Omega_{n_0}}$, we have $\langle -\Delta\hat{u}_{n_0}, \hat{u}_{n_0}\rangle_V = \left\langle -\Delta^D_{\Omega} u_{n_0}, u_{n_0}\right\rangle_{\Omega^*} \leq s_{\Omega_{n_0}} + \frac{\epsilon}{2}$. Then, we have

$$\begin{aligned}\langle H(\lambda)\hat{u}_{n_0}, \hat{u}_{n_0}\rangle_V &= \langle -\Delta\hat{u}_{n_0}, \hat{u}_{n_0}\rangle_V + \lambda\,\langle b\hat{u}_{n_0}, \hat{u}_{n_0}\rangle_V \\ &= \left\langle -\Delta^D_{\Omega_{n_0}} u_{n_0}, u_{n_0}\right\rangle_{\Omega^*} + \lambda \sum_{x\in\Omega_{n_0}} \underbrace{b(x)}_{\leq 1/n_0} u_{n_0}(x)^2\mu(x) \\ &+ \lambda \sum_{x\in V-\Omega_{n_0}} b(x)\underbrace{\hat{u}_{n_0}(x)^2}_{0}\mu(x).\end{aligned}$$

Moreover, we have the relation $\sum_{x\in\Omega_{n_0}} u_{n_0}(x)^2\mu(x) = \sum_{x\in\Omega^*_{n_0}} u_{n_0}(x)^2\mu_{\Omega^*_{n_0}}(x) = ||u_{n_0}||^2_{\Omega^*_{n_0}}$ since $\mu_{\Omega^*_{n_0}}(x) = \mu(x)$ for $x \in \Omega_{n_0}$ and $u_{n_0}(x) = 0$ for $x \in \partial\Omega_{n_0}$. Hence, we obtain

$$\langle H(\lambda)\hat{u}_{n_0}, \hat{u}_{n_0}\rangle_V \leq s_{\Omega_{n_0}} + \frac{\epsilon}{2} + \frac{\lambda}{n_0}||u_{n_0}||^2_{\Omega^*_{n_0}} \leq s_{\Omega_{n_0}} + \epsilon.$$

In particular, we have $s(\lambda) \leq s_{\Omega_{n_0}} + \epsilon$ and using the fact that the sequence $(s_{\Omega_n})_{n\geq 1}$ is increasing, we obtain $s(\lambda) \leq s_{\Omega_{n_0}} + \epsilon \leq \lim_{n\to\infty} s_{\Omega_n} + \epsilon$. Since this relation is true for all $\epsilon > 0$ and $\lambda > 0$, we find

$$s(\infty) \leq \lim_{n\to\infty} s_{\Omega_n}.$$

Thus, we have

$$s(\infty) = \lim_{n\to\infty} s_{\Omega_n} = \lim_{n\to\infty} s(-\Delta^D_{\Omega_n}).$$

□

5.3 An application to certain Jacobi matrices

In this section, we study the particular case of the unweighted 2-regular graph $G = \mathbb{Z}$ and give the exact value of $s(\infty)$ in that case. The laplacian $-\Delta$ is acting on $\ell^2(\mathbb{Z})$ and can be represented by the following infinite tridiagonal matrix which is a particular Jacobi matrix.

$$-\Delta = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & & \\ \ddots & 2 & -1 & & 0 & \\ & -1 & 2 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & -1 & \\ & 0 & & -1 & 2 & \ddots \\ & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

In the following, we will forget the factor $\frac{1}{2}$ since it is not relevant for the study of the spectrum. In the same way, we can represent the Schrödinger operator $H := -\Delta + b$ with a potential $b : \mathbb{Z} \longrightarrow \mathbb{R}$ as the Jacobi matrix acting on $\ell^2(\mathbb{Z})$.

$$H = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & & & & \\ \ddots & 2+b_0 & -1 & & 0 & \\ & -1 & 2+b_1 & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & -1 & \\ & 0 & & -1 & 2+b_n & \ddots \\ & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$

For any connected subset $\Omega = \{n_0, n_0+1, \ldots, n_0+p-1\}$ of $\mathbb{Z}$ of lenght p, we can represent the Laplacian with Dirichlet boundary condition $-\Delta_\Omega^D$ by the following matrix of size p.

$$-\Delta_p^D = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & & \\ -1 & 2 & \ddots & & \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ & & \ddots & 2 & -1 \\ & & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}.$$

It is well known that $\sigma(-\Delta_p^D) = \left\{\mu_k = 2 - 2\cos(\frac{k\pi}{p+1}) = 4\sin^2(\frac{k\pi}{2(p+1)})\right\}_{k=1\ldots p}$ (see [St] or [IK]). In particular, the smallest eigenvalue is $s_p := \mu_1 = 4\sin^2(\frac{\pi}{2(p+1)})$ and it is decreasing when the size p of the matrix increases. To establish our results, we will need the following well known fact (see [Mo]).

Proposition 4.5.5. *Let G be an infinite graph and $(G_i)_{i\in\mathbb{N}}$ be the connected components of G : $G = \bigcup\limits_{i\in\mathbb{N}} G_i$. Each of the components G_i may be finite or infinite. Then*

$$\sigma(-\Delta_G) = \overline{\bigcup_{i\in\mathbb{N}} \sigma(-\Delta_{G_i})} \text{ and } \sigma_p(-\Delta_G) = \bigcup_{i\in\mathbb{N}} \sigma_p(-\Delta_{G_i}),$$

where σ_p is the set of eigenvalues. In particular, we have $s(-\Delta_G) = \inf\limits_{i\in\mathbb{N}}(s(-\Delta_{G_i}))$. The same results holds for the Laplacian with Dirichlet boundary conditions.

We prove

Theorem 4.5.6. *Let $b = (b_n)_{n\in\mathbb{Z}}$ be a non-negative potential such that $b = 0$ on a non-empty set $\Omega \subset \mathbb{Z}$ and $b \geq \beta > 0$ on $\mathbb{Z} - \Omega$. Let $(\Omega_i)_i \in \mathbb{N}$ be the connected components of $\Omega : \Omega = \bigcup\limits_{i\in\mathbb{N}} \Omega_i$. Let $p_i = \#\Omega_i$ and $p = \sup\limits_{i\in\mathbb{N}}(p_i)$.*

If $p = +\infty$, then $s(\infty) = 0$.

If $p < +\infty$, then $s(\infty) = s_p = 4\sin^2(\frac{\pi}{2(p+1)})$ the smallest eigenvalue of the Dirichlet Laplacian of size p.

Proof. Without a loss of generality, we can suppose that the sequence $(p_i)_{i\in\mathbb{N}}$ is increasing (we can reorder the Ω_i if needed).

If $p = +\infty$, then $(p_i)_{i\in\mathbb{N}}$ is not bounded and goes to infinity. Let $u_i = \chi_{\Omega_i}$. We have $||u_i||^2 = p_i$ and then $\frac{\langle H(\lambda)u_i, u_i\rangle}{||u_i||^2} = \frac{\langle -\Delta u_i, u_i\rangle}{p_i} = \frac{2}{p_i} \underset{p_i\to+\infty}{\longrightarrow} 0$. This shows that $s(\lambda) = 0$ for all $\lambda \geq 0$ and then $s(\infty) = 0$.

If $p < +\infty$, the sequence $(p_i)_{i\in\mathbb{N}}$ is an increasing and bounded sequence of integers. Then $(p_i)_{i\in\mathbb{N}}$ converges to $p = \sup\limits_{i\in\mathbb{N}}(p_i)$ and there exists a rank i_0 such that $p_i = p$ for all $i \geq i_0$. Using that fact along with the formula $s_{p_i} = s(-\Delta_{p_i}^D) = 4\sin^2(\frac{\pi}{2(p_i+1)})$, we see that the sequence $(s_{p_i})_{i\in\mathbb{N}}$ is first decreasing then stays constant and equal to s_p. Finally, Proposition 4.5.5 assures that $s(-\Delta_\Omega^D) = \inf\limits_{i\in\mathbb{N}}(s_{p_i}) = s_p$.

Now, Theorem 4.5.3 implies that $s(\infty) = s(-\Delta_\Omega^D) = s_p = 4\sin^2(\frac{\pi}{2(p+1)})$.

$\square$

In the general case, we prove

Theorem 4.5.7. *Let $b = (b_n)_{n\in\mathbb{Z}}$ be a non-negative potential such that $\inf_{n\in\mathbb{N}} b_n = 0$. For $p \geq 1$ we note $Int(p)$ the set of all intervals of $\mathbb{Z}$ of lenght p and for $I_p \in Int(p)$ we consider the sum $\alpha_{I_p} := \sum_{i\in I_p} b_i$. Let $p^* := \sup\left\{p | \inf_{I_p\in Int(p)} \alpha_{I_p} = 0\right\}$.*

If $p^* = +\infty$, then $s(\infty) = 0$.

If $p^* < +\infty$, then $s(\infty) = s_{p^*} = 4\sin^2(\frac{\pi}{2(p^*+1)})$ the smallest eigenvalue of the Dirichlet Laplacian of size p^*.

Proof. Let $\Omega_n := \left\{k \in \mathbb{Z}, b_k \leq \frac{1}{n}\right\}$. Let $(\Omega_{n,i})_{i\in\mathbb{N}}$ be the connected components of Ω_n : $\Omega_n = \bigcup_{i\in\mathbb{N}} \Omega_{n,i}$ and $p_{n,i} := \#(\Omega_{n,i})$. Without a loss of generality, we can suppose that the sequence $(p_{n,i})_{i\in\mathbb{N}}$ is increasing (we can reorder the $\Omega_{n,i}$ if needed). Let $p_n = \sup_{i\in\mathbb{N}}(p_{n,i})$.

If $p_n = +\infty$ for all $n \in \mathbb{N}$, the potential $b = (b_n)_{n\in\mathbb{Z}}$ vanishes in at least one direction. In that case, b does not satisfy $(MC(\delta, R))$ for any $\delta > 0$ and $R > 0$ and hence $s(\lambda) = 0$ for all $\lambda \geq 0$ and so $s(\infty) = 0$. Moreover, it is clear that we also have $p^* = +\infty$.

If there exists n_0 such that $p_{n_0} < +\infty$, then for all $n \geq n_0$, we have $p_n \leq p_{n_0} < +\infty$, since $\Omega_n \subset \Omega_{n_0}$. Moreover, the condition $\inf_{n\in\mathbb{N}} b_n = 0$ implies that the sequence $(p_n)_{n\in\mathbb{N}}$ is bounded from below by 1. Then the sequence $(p_n)_{n\in\mathbb{N}}$ is a decreasing and bounded sequence of integers so $(p_n)_{n\in\mathbb{N}}$ converges to $p' = \inf_{n\in\mathbb{N}}(p_n)$ and there exists a rank N such that $p_n = p_N = p'$ for all $n \geq N$. Now, we use Theorem 4.5.4 and Proposition 4.5.5 which assure that

$$s(\infty) = \lim_{n\to\infty} s_{\Omega_n} = \lim_{n\to\infty} \inf_{i\in\mathbb{N}}(s_{\Omega_{n,i}}).$$

But for $n \geq n_0$, the sequence of integers $(p_{n,i})_{i\in\mathbb{N}}$ is increasing and bounded then we have $p_{n,i} = p_n$ for all $i \geq i_0$. This implies that $s_{\Omega_{n,i}} = s_{p_{n,i}} = s_{p_n}$ for all $i \geq i_0$. Moreover, for $j \leq i_0$, we have $p_{n,j} \leq p_{n,i_0} = p_n$ and then $s_{p_{n,j}} \geq s_{p_{n,i_0}} = s_{p_n}$. We can then conclude that $\inf(s_{\Omega_{n,i}}, i \in \mathbb{N}) = s_{\Omega_n}$. Now, we use the fact that $p_n = p_N = p'$ for all $n \geq N$. We then have $s(\infty) = \lim_{n\to\infty} s_{p_n} = s_{p_N}$.

It remains to show that $p_N = p^*$. Note that $p_{N_0} < +\infty$ implies that $p^* < +\infty$. We then have $p^* = \max\left\{p | \inf_{I_p\in Int(p)} \alpha_{I_p}\right\}$ and we can consider the set $Int(p^*)$. Since $\inf_{I_{p^*}\in Int(p^*)} \alpha_{p^*} = 0$, for all $n \in \mathbb{N}$, we can find an interval $I_{p^*,n}$ of length p^* such that $\sum_{i\in I_{p^*,n}} b_i < \frac{1}{n}$. In particular, for all $i \in I_{p^*,n}$, we have $b_i < \frac{1}{n}$. Therefore, $I_{p^*,n}$ is included in one of the connected components of Ω_n, say $\Omega_{n,l}$ which is an interval of length $p_{n,l}$. We then have $p^* \leq p_{n,l} \leq p_n$ by definition of p_n. Since this relation is true for all $n \in \mathbb{N}$, we have $p^* \leq p_N$.

For all $n \geq N$, there exists a connected component Ω_{n,i_n} of Ω_n of length p_n (because p_n is a maximum). Moreover, we have seen that $p_n = p_N$ and then $\Omega_{n,i_n} \in Int(p_N)$. We have $\alpha_{\Omega_{n,i_n}} := \sum_{i\in\Omega_{n,i_n}} b_i \leq \frac{p_n}{n} = \frac{p_N}{n} \underset{n\to+\infty}{\longrightarrow} 0$. This proves that $\inf_{I\in Int(p_N)} \alpha_I = 0$ and then $p^* \geq p_N$.

Finally, $p_N = p^*$ and $s(\infty) = s_{p^*} = 4\sin^2(\frac{\pi}{2(p^*+1)})$.

□

Chapitre 5

Le bas du spectre essentiel des opérateurs de Schrödinger sur les graphes infinis

1 Introduction

Ce chapitre porte sur l'étude du bas du spectre essentiel des opérateurs de Schrödinger $H = -\Delta + b$ sur les graphes que nous noterons $s_{ess}(H) := \inf \sigma_{ess}(H)$. Nous présentons la version discrète des résultats de G. Metafune et D. Pallara dans le cas euclidien [MP] et de ceux de C. Poupaud dans le cas des variétés Riemanniennes [Po]. Ces travaux fournissent une minoration de $s_{ess}(H)$ à l'aide d'une quantité dépendant du comportement du potentiel en l'infini. De telles caractérisations permettent par exemple d'obtenir des conditions sous lesquelles le spectre de l'opérateur de Schrödinger ne contient que des valeurs propres.

Tout d'abord, remarquons que la relation $s_{ess}(H) \geq s(H)$ implique que les minorations obtenues dans les chapitres 3 et 4 valent également pour le bas du spectre essentiel. Cependant, le théorème de Weyl, qui affirme que $\sigma_{ess}(A + K) = \sigma_{ess}(A)$ avec A auto-adjoint et K compact, implique que c'est le comportement en l'infini du potentiel qui influe sur le spectre essentiel de l'opérateur de Schrödinger H. Ainsi, la condition de moyenne ($MC(\delta, R)$) introduite aux chapitres précédents qui porte sur tout l'espace n'est pas forcément adaptée à l'étude du spectre essentiel.

Dans le cas euclidien, [MP] proposent une minoration de $s_{ess}(-\Delta + V)$ faisant intervenir le comportement en l'infini des quantités

$$|\{y \in B(x,r) : V(y) \leq L\}|, \tag{5.1}$$

pour des potentiels V positifs. Leur preuve repose sur une partition $\mathbb{R}^d$ avec des cubes de taille d puis de l'utilisation de l'inégalité de Poincaré $L^p - L^2$ sur ces cubes. Leur résultat leur permet de déduire par exemple un critère de discrétion du spectre de H ou encore un critère de stabilité exponentielle du semi-groupe e^{-tH} associé à H.

Dans le cas des variétés Riemanniennes M, une généralisation est fournie par [Po], qui nécessite cependant des hypothèses supplémentaires sur la géométrie de la variété :

- le doublement local $(D(r_0))$: il existe $r_0 > 0$ et $C_1 > 0$ tels que pour tout $r \leq r_0/2$,

$$|B(x,2r)| \leq C_1|B(x,r)|. \tag{$D(r_0)$}$$

- les inégalités de Sobolev-Poincaré $L^q - L^2$ sur les boules $(SPI(r_0))$ pour $q > 2$ et $r_0 > 0$: il existe $q > 2$, $r_0 > 0$ et $C_2 > 0$ tels que pour tout $r \leq r_0/2$, pour tout $x \in M$,

$$\left(\int_{B(x,r)} |u - u_{B(x,R)}|^q\right)^{1/q} \leq C_2 r|B(x,r)|^{1/q-1/2}\left(\int_{B(x,R)} |\nabla u|^2\right)^{1/2}, \tag{$SPI(r_0)$}$$

où $u_{B(x,R)}$ est la moyenne de u sur la boule $B(x,r)$ et $|B(x,r)|$ est le volume de $B(x,r)$.

D'autre part, la quantité (5.1) doit également intégrer le volume des boules. Pour $L > 0$, l'auteur introduit l'ensemble $E_L := \{x \in M : V(x) < L\}$ et les quantités

$$\alpha_{r,L} := \limsup_{|x|\to+\infty} \frac{|E_L \cap B(x,r)|}{|B(x,r)|}$$

pour $r \leq r_0/2$. Il montre alors le théorème suivant.

Theorem 5.1.1. *On suppose que M vérifie $(D(r_0))$ et $(SPI(r_0))$ et que le potentiel V est positif. Si pour un certain $r \leq r_0/2$, il existe $\alpha \in (0,1)$ tel que pour tout $L > 0$, $\alpha_{r,L} < \alpha$, alors*

$$\sigma_{ess}(-\Delta + V) \subset \left[\frac{(\alpha^{1/q-1/2}-1)^2}{C_1^2 C_2^2 r^2}, \infty\right).$$

On déduit de ce théorème que si $\lim_{|x|\to+\infty} \frac{|y \in B(x,r) : V(y) < L|}{|B(x,r)|} = 0$ alors, le spectre de $-\Delta + V$ est discret.

Nous démontrons dans la section suivante la version discrète du théorème 5.1.1 pour les graphes pondérés. La preuve est essentiellement la même avec quelques modifications techniques spécifiques au cas des graphes. Cependant, bien que nous utiliserons la version discrète des inégalités de Sobolev-Poincaré $L^q - L^2$, nous n'aurons pas besoin de la condition de doublement de volume comme dans le cas continu. En effet, les graphes considérés dans cette thèse vérifie l'hypothèse $(UBD(D))$ (introduite dans le chapitre 4) de majoration uniforme des degrés des sommets. Cette hypothèse géométrique permet alors d'obtenir le résultat.

Enfin, nous expliquons comment obtenir des améliorations de ce résultat dans le cas particulier de l'espace $\mathbb{Z}^d$ qui correspond alors à la version discrète du résultat de [MP].

2 Le cas des graphes.

Nous aurons besoin des hypothèses géométriques suivantes sur le graphe. Nous supposons que le graphe est connexe, simple et uniformément localement fini, c'est à dire que le degré des sommets est uniformément borné. Nous avons déjà introduit cette hypothèse dans le chapitre 4 sous la forme (UBD). Ici, nous spécifions la notation en indiquant que le graphe G vérifie la condition $(UBD(D))$ pour une constante $D>0$ si

$$d(x) \leq D < +\infty, \text{ pour tout } x \in V. \tag{$UBD(D)$}$$

D'autre part, nous introduisons les inégalités de Sobolev-Poincaré $(SPI_{q-2}(R))$ pour un certain $R>0$ et $q>2$: il existe une constante $C(R)>0$ telle que pour tout $x \in V$ et toute fonction f sur V,

$$\left(\sum_{y\in B}|f(y)-f_B|^q\mu_B(y)\right)^{\frac{1}{q}} \leq C(R)\mu(B)^{\frac{1}{q}-\frac{1}{2}}\sum_{e\in B}|\nabla f(e)|^2\mu(e), \tag{$SPI_{q-2}(R)$}$$

où $B=B(x,R)$, $\mu(B)=\sum_{y\in B}\mu_B(y)$ et $f_B=\frac{1}{\mu(B)}\sum_{y\in B}f(y)\mu_B(y)$.

La Proposition suivante donne une majoration de la norme ℓ^q d'une fonction définie sur la boule à partir de l'hypothèse $(SPI_{q-2}(R))$.

Proposition 5.2.1. *Supposons que G vérifie $(SPI_{q-2}(R))$. Pour tout $\epsilon>0$, pour tout $x\in V$, on a, en notant $B=B(x,R)$,*

$$||f||^2_{\ell^q(B)} \leq \mu(B)^{\frac{2}{q}-1}\left[C(R)^2\left(1+\frac{1}{\epsilon}\right)||\nabla f||^2_{\ell^2(B)}+(1+\epsilon)\,||f||^2_{\ell^2(B)}\right].$$

Preuve. L'inégalité $(SPI_{q-2}(R))$ implique

$$||f||_{\ell^q(B)} \leq C(R)\mu(B)^{\frac{1}{q}-\frac{1}{2}}||\nabla f||_{\ell^2(B)}+||f_B||_{\ell^q(B)}.$$

D'autre part, l'inégalité de Cauchy-Schwartz donne

$$f_B=\frac{1}{\mu(B)}\sum_{y\in B}f(y)\mu_B(y)\leq \mu(B)^{-\frac{1}{2}}\left(\sum_{y\in B}f(y)^2\mu_B(y)\right)^{\frac{1}{2}}=\mu(B)^{-\frac{1}{2}}||f||_{\ell^2(B)}.$$

On a donc

$$||f_B||_{\ell^q(B)}=\mu(B)^{\frac{1}{q}}f_B\leq \mu(B)^{\frac{1}{q}-\frac{1}{2}}||f||_{\ell^2(B)}.$$

On obtient alors

$$||f||_{\ell^q(B)}\leq \mu(B)^{\frac{1}{q}-\frac{1}{2}}\left(C(R)||\nabla f||_{\ell^2(B)}+||f||_{\ell^2(B)}\right). \tag{5.2}$$

Il suffit alors d'utiliser l'inégalité $(a+b)^2 \leq \left(1+\frac{1}{\epsilon}\right)a^2+(1+\epsilon)\,b^2$ pour trouver le résultat. $\square$

Dans le cas des graphes non pondérés, [Del2] montre que la relation (5.2) obtenue dans la preuve précédente se déduit des inégalités de Poincaré (définies dans le chapitre précédent) et d'une condition de doublement de volume (cette dernière condition étant impliquée par la condition $(UBD(D))$). Cette remarque sera importante pour le traitement du cas particulier du graphe non pondéré $\mathbb{Z}^d$.

Définissons à présent les quantités suivantes, utiles à la résolution du problème. Pour $M > 0$, soit E_M l'ensemble $E_M := \{x \in V, b(x) < M\}$. Pour $r > 0$, on définit alors la quantité

$$\alpha_{r,M} := \limsup_{|x|\to\infty} \frac{\mu\left(E_M \cap B(x,r)\right)}{\mu\left(B(x,r)\right)}.$$

On dira que le potentiel b satisfait la condition $(C(R,\alpha))$ pour un certain $0 < \alpha < 1$ si

$$\alpha_{R,M} < \alpha \text{ pour tout } M > 0. \tag{$C(R,\alpha)$}$$

On démontre alors le résultat suivant pour des potentiels positifs.

Theorem 5.2.2. *Supposons que le graphe $G = (V,E,\mu)$ vérifie l'hypothèse $(UBD(D))$ pour une constante $D > 0$ et les inégalités de Sobolev-Poincaré $(SPI_{q-2}(R))$ pour $R > 0$ et $q > 2$. On considère un potentiel $b = b^+$ positif. Si il existe $0 < \alpha < 1$ tel que le potentiel b vérifie $(C(R,\alpha))$, alors on a*

$$\sigma_{ess}(-\Delta + b) \subset \left[\frac{\left(1-\alpha^{1/q-1/2}\right)^2}{NC(R)^2}, +\infty\right),$$

où N est une constante ne dépendant que de R et de D.

Preuve. Soit $R > 0$ comme dans $(SPI_{q-2}(R))$ et $(C(R,\alpha))$. On écrira parfois B pour $B(x,R)$.

L'hypothèse $(C(R,\alpha))$ implique qu'il existe une constante $R_1 > 0$ telle que pour tout x vérifiant $|x| > R_1$, pour tout $\alpha < \beta < 1$, on ait

$$\mu\left(E_M \cap B(x,R)\right) \le \beta\mu\left(B(x,R)\right). \tag{5.3}$$

On a, par définition de l'ensemble E_M

$$\sum_{y\in B-E_M} u^2(y)\mu_B(y) \le \frac{1}{M}\sum_{y\in B} b^+(y)u^2(y)\mu_B(y).$$

D'autre part, en utilisant successivement l'inégalité de Hölder, la relation 5.3 puis la

Proposition 5.2.1, on obtient

$$\begin{aligned}\sum_{y\in B\cap E_M} u^2(y)\mu_B(y) &\leq \mu(B\cap E_M)^{1-2/q}(\sum_{y\in B\cap E_M} u^2(y)\mu_B(y))^{2/q}\\ &\leq \beta^{1-2/q}\mu(B)^{1-2/q}(\sum_{y\in B\cap E_M} u^2(y)\mu_B(y))^{2/q}\\ &\leq \beta^{1-2/q}\left[C(R)^2\left(1+\frac{1}{\epsilon}\right)\sum_{e\in B}|\nabla f(e)|^2\mu(e)+(1+\epsilon)\sum_{y\in B} f(y)^2\mu_B(y)\right].\end{aligned}$$

Ces deux inégalités donnent alors

$$\begin{aligned}\sum_{y\in B} u^2(y)\mu_B(y) \leq &\frac{1}{M}\sum_{y\in B} b^+(y)u^2(y)\mu_B(y)\\ &+\beta^{1-2/q}\left[C(R)^2\left(1+\frac{1}{\epsilon}\right)\sum_{e\in B}|\nabla f(e)|^2\mu(e)+(1+\epsilon)\sum_{y\in B} f(y)^2\mu_B(y)\right],\end{aligned}$$

ou encore

$$\begin{aligned}&M(1-(1+\epsilon)\beta^{1-2/q})\sum_{y\in B} u^2(y)\mu_B(y) \leq\\ &\qquad M\beta^{1-2/q}C(R)^2(1+\frac{1}{\epsilon})\sum_{e\in B}|\nabla f(e)|^2\mu(e)+\sum_{y\in B} b^+(y)u^2(y)\mu_B(y).\end{aligned}$$

On choisit à présent $M = \frac{1}{\beta^{1-2/q}C(R)^2(1+\frac{1}{\epsilon})}$ et on pose $C = M(1-(1+\epsilon)\beta^{1-2/q})$, ce qui fournit la relation suivante, valable pour tout x tel que $|x| > R_1$.

$$C\sum_{y\in B} u^2(y)\mu_B(y) \leq \sum_{e\in B}|\nabla u(e)|^2\mu(e)+\sum_{y\in B} b^+(y)u^2(y)\mu_B(y). \tag{5.4}$$

On considère à présent le potentiel $\tilde{b}$ suivant

$$\tilde{b} = \begin{cases} b^+ + C & \text{si } |x| \leq R_1 + R,\\ b & \text{si } |x| > R_1 + R.\end{cases}$$

Il est clair que le potentiel $\tilde{b}$ ainsi construit vérifie la relation (5.4) sur chaque boule $B(x,R)$ pour tout $x \in V$.

Maintenant, puisque le graphe vérifie $(UBD(D))$, on peut utiliser le Lemme 4.3.2 énoncé dans le chapitre 4 pour recouvrir l'espace avec des boules de rayon R. Ainsi, il existe des boules $(B_k := B(x_k, R))_{k\in\mathbb{N}}$ telles que $V = \bigcup_{k\geq 0} B_k$ et $E = \bigcup_{k\geq 0} E_{B_k}$. De plus, chaque sommet $x \in V$ et chaque arête $e \in E$ appartient à au plus N boules. Ainsi, en notant $I_y := \{k \in \mathbb{N},\, y \in B_k\}$ et $I_e := \{k \in \mathbb{N}, e \in B_k\}$, on a $\#I_y \leq N$ pour tout $y \in V$ et $\#I_e \leq N$ pour tout $e \in E$. Dans la suite, on notera parfois B_k pour E_{B_k}.

Tout d'abord, on a

$$\sum_{y\in V} u^2(y)\mu(y) \le \sum_{k\in\mathbb{N}} \sum_{y\in B_k} u^2(y)\mu_{B_k}(y). \tag{5.5}$$

En effet, on a $\sum_{k\in\mathbb{N}} \sum_{y\in B_k} u^2(y)\mu_{B_k}(y) = \sum_{y\in V} \sum_{k\in I_y} u^2(y)\mu_{B_k}(y) \ge \sum_{y\in V} u^2(y)\mu(y)$ d'après la Proposition 4.3.3 du chapitre 4. Ainsi, en combinant la relation (5.5) et la relation (5.4) appliquée à $\tilde{b}$, on obtient

$$\begin{aligned} C\sum_{y\in V} u^2(y)\mu(y) &\le C\sum_{k\in\mathbb{N}} \left(\sum_{e\in E_{B_k}} |\nabla u(e)|^2\mu(e) + \sum_{y\in B_k} \tilde{b}^+(y)u^2(y)\mu_{B_k}(y) \right) \\ &\le \sum_{e\in E} \sum_{k\in I_e} |\nabla u(e)|^2\mu(e) + \sum_{y\in V} \sum_{k\in I_y} \tilde{b}^+(y)u^2(y)\mu_{B_k}(y) \\ &\le N \left(\sum_{e\in E} |\nabla u(e)|^2\mu(e) + \sum_{y\in V} \tilde{b}^+(y)u^2(y)\mu(y) \right), \end{aligned}$$

car $\mu_{B_k}(y) \le \mu(y)$ pour tout $y \in V$ et pour tout $k \in \mathbb{N}$.

Finalement, on a

$$\sum_{e\in E} |\nabla u(e)|^2\mu(e) + \sum_{y\in V} \tilde{b}^+(y)u^2(y)\mu(y) \ge \frac{C}{N} \sum_{y\in V} u^2(y)\mu(y),$$

ce qui prouve que

$$\inf \sigma(-\Delta + \tilde{b}) \ge \frac{C}{N},$$

et donc que

$$\inf \sigma_{ess}(-\Delta + b) \ge \frac{C}{N}$$

puisque $\tilde{b}$ est une perturbation compacte de b. De plus, on a

$$\frac{C}{N} = \frac{(1-(1+\epsilon)\beta^{1-2/q})}{N\beta^{1-2/q}C(R)^2(1+\frac{1}{\epsilon})}.$$

Cette relation étant vrai pour tout $\alpha < \beta < 1$ et tout $\epsilon > 0$, on obtient finalement

$$\inf \sigma_{ess}(-\Delta + b) \ge \frac{\left(1-\alpha^{1/q-1/2}\right)^2}{NC(R)^2}.$$

□

Il est intéressant de noter qu'il est possible de majorer la constante N introduite dans le Lemme de recouvrement 4.3.2 et utilisée dans la preuve ci-dessus. En effet, la preuve de ce Lemme indique que $N \le D^{R+1}$. Ainsi, on spécifier le résultat du

Théorème 5.2.2 de la manière suivante :

$$\sigma_{ess}(-\Delta + b) \subset \left[\frac{\left(1 - \alpha^{1/q-1/2}\right)^2}{D^{R+1}C(R)^2}, +\infty \right),$$

où D est la constante de l'hypothèse $(UBD(D))$.

D'autre part, on peut également étendre le Théorème 5.2.2 à des potentiels $b = b^+ - b^-$ de signe quelconque. En effet, comme expliqué dans la remarque 3.2.4, la construction des opérateurs de Schrödinger pour de tels potentiels par le théorème KLMN implique que la partie négative du potentiel doit être bornée : $\exists A > 0, b^- \leq A$. On aboutit alors à la généralisation triviale suivante du Théorème 5.2.2 pour des potentiels de signe quelconque.

$$\sigma_{ess}(-\Delta + b) \subset \left[\frac{\left(1 - \alpha^{1/q-1/2}\right)^2}{D^{R+1}C(R)^2} - A, +\infty \right).$$

Cependant, dans le cas de $\mathbb{Z}^d$, une amélioration est sans doute possible en s'inspirant des méthodes du chapitre 5 en considérant une hypothèse plus générale sur le potentiel total $b = b^+ - b^-$ et non pas sur la partie positive seulement.

Enfin, comme dans [MP] et [Po], on obtient facilement les corolaires suivants. Le premier donne une condition de discrétion du spectre de l'opérateur de Schrödinger.

Corollary 5.2.3. *Supposons que le graphe $G = (V, E, \mu)$ vérifie l'hypothèse $(UBD(D))$ pour une constante $D > 0$ et les inégalités de Sobolev-Poincaré $(SPI_{q-2}(R))$ pour avec $R > 0$ et $q > 2$. Supposons que le potentiel b vérifie $\alpha_{R,M} := \limsup_{|x|\to\infty} \frac{\mu(E_M \cap B(x,R))}{\mu(B(x,R))} = 0$ pour tout $M > 0$. Alors on a*

$$\sigma_{ess}(-\Delta + b) = \emptyset,$$

c'est à dire, le spectre de $-\Delta + b$ est constitué de valeurs propres de multiplicités finies.

Le second montre la stabilité exponentielle du semi-groupe généré par $H = -\Delta + b$ sous les hypothèses du Théorème 5.2.2.

Corollary 5.2.4. *Supposons les hypothèses du Théorème 5.2.2. Alors, il existe $\delta > 0$ tel que*

$$\sigma(-\Delta + b) \subset [\delta, +\infty).$$

3 Le cas de $\mathbb{Z}^d$

Nous pouvons adapter le Théorème 5.2.2 dans le cas du graphe non pondéré $\mathbb{Z}^d$ en utilisant le théorème 4.4 de [Del2]. Tout d'abord, $\mathbb{Z}^d$ vu en tant que graphe non pondéré vérifie la propriété $UBD(D)$ avec $D = 2d$, ce qui implique la propriété de doublement de volume dans ce cas (voir [Del2]). D'autre part, il est facile d'établir les inégalités de Poincaré sur Z^d. En effet, la connaissance de la première valeur propre non nulle $\mu_1 = 4d\sin^2(\frac{\pi}{2R})$ du laplacien de Neumann sur le cube $C_R := C(x,R)$ de $\mathbb{Z}^d$ de coin inférieur gauche x et de côté R (voir [IK], [St]) donne l'inégalité de Poincaré suivante. Pour $R > 0$ donné, il existe une constante C telle que

$$||f - f_{C_R}||_2^2 \leq C^2R^2||\nabla f||_2^2, \qquad (PI(R))$$

Les hypothèses du théorème 4.4 de [Del2] sont donc vérifiées dans le cas du graphe non pondéré Z^d, ce qui permet d'obtenir les inégalités de type Sobolev-Poincaré sous la forme suivante. Pour $R > 0$ donné, il existe $q > 2$ et $C > 0$ telle que pour tout $x \in \mathbb{Z}^d$ et toute fonction f sur $\mathbb{Z}^d$,

$$||f||^2_{\ell^q(C_R)} \leq R^{\frac{2d}{q}-d}\left(C^2R^2||\nabla f||^2_{\ell^2(C_R)} + ||f||^2_{\ell^2(C_R)}\right) \qquad (SPI'_{q-2}(R))$$

où $C_R := C(x,R)$ est le cube de $\mathbb{Z}^d$ de coin inférieur gauche x et de côté R. Notons que les inégalités $(SPI'_{q-2}(R))$ ci-dessus sont une version plus faible des inégalités de Sobolev-Poincaré $(SPI_{q-2}(R))$ données dans le cas des graphes pondérés. Cependant, les inégalités $(SPI'_{q-2}(R))$ correspondent à la relation (5.2) obtenue dans la preuve de la Proposition 5.2.1 et qui suffit à établir nos résultats.

Pour $M > 0$, soit E_M l'ensemble $E_M := \left\{x \in \mathbb{Z}^d, b(x) < M\right\}$. Pour $r > 0$, on définit alors la quantité

$$\alpha_{r,M} := \limsup_{|x|\to\infty} \frac{|\,(E_M \cap C(x,r))\,|}{r^d}.$$

On dira que le potentiel b satisfait la condition $(C'(R,\alpha))$ pour un certain $0 < \alpha < 1$ si

$$\alpha_{R,M} < \alpha \text{ pour tout } M > 0. \qquad (C'(R,\alpha))$$

Sous ces hypothèses, la même démonstration que dans le cas des graphes permet d'aboutir au résultat suivant.

Theorem 5.3.1. *On considère un potentiel $b = b^+$ positif. Si il existe $0 < \alpha < 1$ tel que le potentiel b vérifie $(C'(R,\alpha))$, alors on a*

$$\sigma_{ess}(-\Delta + b) \subset \left[\frac{\left(1-\alpha^{1/q-1/2}\right)^2}{C^2R^2}, +\infty\right).$$

La régularité du graphe $\mathbb{Z}^d$ permet de choisir une partition de l'espace plutôt que de le recouvrir par des boules. Ainsi, chaque point de réseau n'appartient qu'à un seul cube $C(x,R)$. Ce contrôle permet de gagner la constante $\frac{1}{N}$ qui apparait pour les graphes.

Bibliographie

[AB1] W. ARENDT and C.J.K BATTY, Exponential stability of a diffusion equation with absorption, Differential and Integral Equations, Vol 6, No.5 (1993), 1009-1024. MR 94k :35038

[AB2] W. ARENDT and C.J.K BATTY, The spectral bound of Schrödinger operators, Potential Analysis, Vol 5 (1996), 207-230.

[Ak] S. AKKOUCHE, The spectral bounds of the discrete Schrödinger operator, Journal of Functional Analysis, Vol 259, Issue 6, 1443-1465.

[BCG] M. BARLOW, T. COULHON and A. GRIGOR'YAN, Manifolds and graphs with slow heat kernel decay, Invent. Math. 144 (2001) 609-649.

[Ba] C.J.K BATTY, Asymptotic stability of Schrödinger semigroups : Pth integral methods, Math. Ann., 292 (1992), 457-492.

[B1] J. VON BELOW, Can one hear the shape of a network ?, Lecture Notes in Pure and Applied Mathematics 219 (2001), Marcel Dekker Inc., New York, pp.19-36.

[B2] J. VON BELOW, A characteristic equation associated to an eigenvalue problem on c^2-networks, Lin. Alg. Appl. 71 (1985), 309-325.

[B3] J. VON BELOW, Classical solvability of linear parabolic equations on networks, J. Differential Equ. 72 (1988), 316-337.

[B4] J. VON BELOW, An index theory for uniformly locally finite graphs, Lin. Alg. Appl. 431 (2009), 1-19.

[BL] J. VON BELOW, J. A. LUBARY, The Eigenvalues of the Laplacian on Locally Finite Networks Under Generalized Node Transition, Results in Mathematics, Vol. 54, Numbers 1-2, 15-39.

[Br] R. BROOKS, The spectral geometry of a tower of coverings, J. Differential Geometry 23 (1986), 97-107.

[Ch] F.R.K. CHUNG, Spectral Graph Theory, CBMS Lecture Notes, Regional Conference Series in Mathematics, vol. 92, American Mathematical Society, Providence, RI, 1995, 207pp.

[CG] T. COULHON and A. GRIGOR'YAN, Pointwise estimates for transition probabilities of random walks on infinite graphs, in Trends in Mathematics : Fractals in Graz 2001. Ed. P.Grabner and W.Woess. Birkhäuser 2002. 119-134.

[Co] T. COULHON, Noyau de la chaleur et discrétisation d'une variété riemannienne. (French) [Heat kernel and discretization of a Riemannian manifold] Israel J. Math. 80 (1992), no. 3, 289-300.

[D] J. Dodziuk. Difference Equations, isoperimetric inequality and transience of certain random walks. Trans. Amer. Math. Soc., 284 (1984), No. 2, 787Ű794.

[Del1] T. DELMOTTE, Parabolic Harnack inequality and estimates of Markov chains on graphs, Revista Matemática Iberoamericana, 15, (1999) No.1, 181-232

[Del2] T. DELMOTTE, Inégalité de Harnack elliptique sur les graphes, Colloquium Mathematicum, 72 (1997), 1, 19-37.

[DHKS] D.DAMANIK, D. HUNDERTMARK, R. KILLIP and B. SIMON, Variational estimates for discrete Schrödinger operators with potentials of indefinite sign, Communications in mathematical physics, vol. 238, No.3 (2003), 545-562

[DK] J. DODZIUK and L. KARP, Spectral and function theory for combinatorial Laplacians, Contemporary Mathematics, Vol 73 (1988), 25-40.

[DK2] J. Dodziuk and W.S. Kendall. Combinatorial Laplacians and isoperimetric inequality. From local times to global geometry, control and physics, K. D. Ellworthy Ed., Pitman Research Notes in Mathematics Series, 150 (1986) 68-74.

[DP] J. DODZIUK and V.K. PATODI, Riemannian structures and triangulations of manifolds, J. Indian Math. Soc. (N.S.) 40 (1976), No 1-4, 1-52.

[Fu] H. FURSTENBERG, Random walks and discrete subgroups of Lie groups. Advances in Probability and Related Topics. I (ed. by P. Ney), 1-63. Dekker, New-York (1971).

[GGS] F. GESZTESY, G.M GRAF and B. SIMON, The ground state energy of Schrödinger operators, Communications in Mathematical Physics, No. 150 (1992), 375-384.

[Gr] A. GRIGOR'YAN, Analysis on graphs.

[GT] A. GRIGOR'YAN and A. TELCS, Sub-Gaussian estimates of heat kernels on infinite graphs, Duke Math. J. 109 (2001) no.3, 452-510.

[IK] E. ISAACSON and H.B. KELLER, Analysis of numerical methods, Dover publications, New York, 1994.

[K1] S. KUPIN, On a spectral property of Jacobi matrices, Proc. Amer. Math. Soc. 132 (2004) 1377-1383.

[K2] S. KUPIN, Spectral properties of Jacobi matrices and sum rules of special form, Journal of Functional Analysis 227 (2005), 1-29.

[KS] R. KILLIP and B. SIMON, Sum rules for Jacobi matrices and their applications to spectral theory, Annals of Math. (2), No. 158 (2003), 253-321.

[LNS] A. LAPTEV, S. NABOKO and O. SAFRONOV, On new relations between spectral properties of Jacobi matrices and their coefficients, Comm. Math. Phys. 241 (2003) 91-110.

[LS] T. LYONS and D. SULLIVAN, Function theory, random paths and covering spaces. J. Diff. Geom. 19 (1984), 299-323.

[Ma] T. MANTUNAO, Discretization of Compact Riemannian Manifolds Applied to the Spectrum of Laplacian, Annals of Global Analysis and Geometry, Vol 27, No 1, 33-46.

[Mo] B. MOHAR, The spectrum of an infinite graph, Linear algebra and its applications 48 (1982), 245-256.

[Mo] R.A. MOORE, The least eigenvalue of Hill's equation, J. Anal. Math. 5 (1956/57), 183-196.

[MP] G. METAFUNE, D. PALLARA, On the location of the essential spectrum of Schrödinger operators, Proceedings of the American Mathematical Society, Vol 130 (2001), No 6, 1779-1786

[Mu] D. MUGNOLO, Gaussian estimates for a heat equation on a network, Netw. Heter. Media 2 (2007), 55-79.

[MW] B. MOHAR and W. WOESS, A survey on spectra of infinite graphs, Bull. London Math. Soc. 21 (1989) 209-234.

[Ou1] E.M. OUHABAZ, The spectral bound and principal eigenvalues of Schrödinger operators on Riemannian manifolds, Duke Mathematical Journal, Vol 110, No.1 (2001), 1-35.

[Ou2] E.M. OUHABAZ, Analysis of Heat Equations on Domains, London Math. Soc. Monographs, Vol. 31. Princeton Univ. Press 2004. MR 2124040

[Po] C. POUPAUD, On the essential spectrum of Schrödinger operators on Riemannian manifolds, Math. Z. 251 (2005), 1-20.

[Ro] J.P ROTH, Le spectre du Laplacien sur un graphe, Lecture Notes in Mathematics, 1984, Vol. 1096, 521-539.

[RS] M. REED and B. SIMON, Methods of Modern Mathematical Physics, IV : Analysis of Operators, Academic Press, New York, 1978. MR 99e :35162

[Sh] Z. SHEN, The spectrum of Schrödinger operators with positive potentials in Riemannian manifolds, Proc. Amer. Math. Soc. 131 (2003), 3447-3456.

[St] G. STRANG, The discrete cosine transform, SIAM Review, Vol 41, No.1 (1999), 135-147.

[Te] G. TESCHL, Jacobi Operators and Completely Integrable Nonlinear Lattices, Math. Surv. and Mon. 72, Amer. Math. Soc., Rhode Island, (2000).

[Va] N.T. VAROPOULOS, Brownian motion and random walks on manifolds. Ann. Inst. Fourier 34 (1984), 243-269.

[Wi] A. WINTNER, On the non-existence of conjugate points, Am. J. Math. 73 (1951), 368-380.

[Wo] W. WOESS, Random Walks on Infinite Graphs and Groups, Cambridge Tracts in Mathematics, Vol 138 (2000).

Résumé

Cette thèse traite de la théorie spectrale des opérateurs de Schrödinger discrets $H(\lambda) := -\Delta + b$ sur $\mathbb{Z}^d$ et plus généralement sur des graphes pondérés infinis. Plus précisément, nous étudions le comportement des fonctions spectrales qui représentent les bornes du spectre de ces opérateurs. Un des principaux résultats est l'obtention d'une condition nécessaire et suffisante sur le potentiel b pour que le bas du spectre soit strictement positif. L'étude du haut du spectre est également considérée.

Nous étudions tout d'abord ces questions pour les opérateurs de Schrödinger discrets sur $\mathbb{Z}^d$. La régularité de cet espace permet alors d'obtenir des résultats spécifiques dans ce cas particulier. Nous généralisons ensuite nos travaux au cas des graphes infinis pondérés. Les techniques développées dans ce cadre nous permettent également d'étudier le comportement asymptotique du bas du spectre pour les grandes valeurs de λ.

Mot-clefs: Opérateurs de Schrödinger, Spectre, Bornes, Fonctions spectrales, Graphes

Abstract

This thesis deals with the spectral theory of discrete Schrödinger operators $H(\lambda) := -\Delta + b$ on $\mathbb{Z}^d$ and more generally on infinite weighted graphs. Precisely, we study the behavior of the spectral functions which represent the spectral bounds of these operators. One of the main results is the obtention of a necessary and sufficient condition on the potential b such that the bottom of the spectrum is stricly positive. The study of the top of the spectrum is also treated.

We first study these questions for discrete Schrödinger operators on $\mathbb{Z}^d$. The regularity of this space provides specific results in this particular case. Then we extend our work to the case of infinite weighted graphs. Moreover, the technics developed in this framework allow us to study the asymptotic behavior of the bottom of the spectrum for large values of λ.

Keywords: Schrödinger operators, Spectrum, Bounds, Spectral functions, Graphs