École doctorale IAEM Lorraine

Estimations gaussiennes des noyaux de la chaleur

THÈSE

présentée et soutenue publiquement le 11 décembre 2015

pour l'obtention du

Doctorat de l'Université de Lorraine
(mention mathématiques)

par

Laurent Kayser

Thèse dirigée par Mourad Choulli

Composition du jury

Directeur de thèse :	Mourad Choulli	PR Université de Lorraine
Président :	Thierry Coulhon	PR Paris Sciences et Lettres
Rapporteur :	Abdelaziz Rhandi	PR Université de Salerne
Examinateurs :	Ralph Chill	PR Université de Dresde
	Jérémy Faupin	PR Université de Lorraine
	Victor Nistor	PR Université de Lorraine
	El Maati Ouhabaz	PR Université de Bordeaux
	Frédéric Robert	PR Université de Lorraine

Institut Elie Cartan de Lorraine — UMR 7502

Remerciements

Je tiens en premier lieu à remercier Mourad Choulli qui m'a encadré avec beaucoup de bienveillance et de gentillesse. Du fait de ses grandes connaissances mathématiques et de son sens aigu de la recherche, il a su me guider tout au long de mon doctorat. Je lui suis très reconnaissant d'avoir toujours été à l'écoute et disponible pour répondre à toutes mes questions. Les discussions et le soutien qu'il m'a apporté m'ont été très précieux dans mes choix et décisions. Sans lui, ce travail n'aurait jamais abouti.

Je souhaite exprimer ma gratitude à mes rapporteurs Thierry Coulhon et Abdelaziz Rhandi qui m'ont fait l'honneur d'accepter de rapporter ce manuscrit. Je leur suis reconnaissant pour le temps consacré à mes travaux et l'intérêt qu'ils y ont porté. Je remercie également Ralph Chill, Jérémy Faupin, Victor Nistor, El Maati Ouhabaz et Frédéric Robert d'avoir accepté de faire partie de mon jury.

Je remercie également l'ensemble des membres de l'Institut Elie Cartan de Lorraine et plus particulièrement mes collègues doctorants.

Je tiens à témoigner ma reconnaissance à Yavar Kian, Eric Soccorsi et El Maati Ouhabaz pour m'avoir accueilli dans leur laboratoire respectif et pour le temps qu'ils m'ont accordé durant mes séjours à Marseille et à Bordeaux. J'ai beaucoup apprécié d'avoir pu échanger et travailler avec eux.

Je tiens également à remercier mes deux professeurs de mathématiques de classes préparatoires Christiane Vincent et Emmanuel Leguil pour m'avoir donné le goût des mathématiques. Ils continuent d'être d'une grande aide et d'un grand soutien dans les moments difficiles et je leur en suis très reconnaissant.

J'en arrive à ceux qui m'ont accompagné durant mes années d'études et sans qui ma scolarité aurait été nettement moins drôle et agréable. Du collège avec Pierre-Nicolas aux années d'étudiant avec Romain, Cindy, Simon, Audrey, Jeje et Titi, en passant par le lycée Fabert avec Nico, Hélo, Clo, Ludo, Stef, Marie, Xav et Paul, merci à vous tous !

Je remercie bien sûr ma famille qui a toujours été présente pour moi. Je pense à mes sœurs Delphine et Claire, aux Mumere Jules, Pascal, Céline, Béa et Dany et surtout à mes parents. Je veux leur dire un grand merci pour avoir toujours été là pour moi et pour avoir tout fait pour que ma scolarité se passe dans les meilleures conditions possibles.

Enfin, je souhaite remercier ma conjointe Charlotte pour avoir relu l'orthographe de ma thèse. Je lui suis très reconnaissant de me soutenir au quotidien. Je la remercie infiniment de toujours accepter mes choix et de me suivre dans tous mes projets. Je suis si heureux qu'elle soit à mes côtés chaque jour et que l'on puisse voir grandir ensemble notre fils Maël. Je lui dois tant.

À Charlotte et Maël

Table des matières

Chapitre 1

Introduction

1.1 Thèmes de recherche

Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés aux estimations gaussiennes pour la solution fondamentale et la fonction de Green-Neumann associées à un opérateur parabolique du second ordre.

Notons que, lorsque les coefficients de l'opérateur ne dépendent pas du temps, une fonction de Green n'est rien d'autre qu'un noyau de la chaleur.

Nous avons également travaillé sur une application des estimations des noyaux de la chaleur à un problème de potentiels isospectraux.

Signalons que les estimations gaussiennes ont des applications dans la théorie spectrale sur les espaces L^p et peuvent permettre d'obtenir des inégalités de type Harnack et un principe de maximum fort. Elles permettent également d'obtenir des estimations $L^p - L^q$ et l'analycité des semi-groupes associés à des noyaux de la chaleur. Les références [24], [42], [46] traitent de ces sujets.

1.2 Estimations gaussiennes : état de l'art

1.2.1 Estimations gaussiennes de la solution fondamentale

Dans ce qui suit, nous utilisons la convention de sommation d'Einstein pour les indices répétés. Nous considérons l'opérateur différentiel du second ordre

$$L = a_{ij}(x,t)\partial^2_{ij} + b_k(x,t)\partial_k + c(x,t) - \partial_t,$$

où les coefficients a_{ij}, b_i, c sont définis sur $P = \mathbb{R}^n \times (t_0, t_1)$ avec $t_0 < t_1$, et la matrice $a_{ij}(x,t)$ est symétrique pour tout $(x,t) \in P$.

Nous supposerons également que la condition d'ellipticité suivante est vérifiée :

$$a_{ij}(x)\xi_i\xi_j \geq \lambda|\xi|^2, \;\; (x,t) \in P, \; \xi \in \mathbb{R}^n.$$

Rappelons que la fonction

$$\mathscr{G}(x,t) = (4\pi t)^{-n/2} e^{-\frac{|x|^2}{4t}}, \;\; x \in \mathbb{R}^n, \; t > 0$$

est usuellement appelée noyau gaussien. Nous posons

$$\mathscr{G}_c(x,t) = c^{-1}\mathscr{G}(\sqrt{c}x,t), \;\; c>0.$$

Definition 1.2.1. *Soit $P = \mathbb{R}^n \times (t_0, t_1)$.*
Une solution fondamentale de $Lu = 0$ est une fonction $E(x,t,\xi,\tau)$ de classe $C^{2,1}$ sur $P^2 \cap \{t > \tau\}$ qui satisfait

$$LE(\cdot\,,\cdot;\xi,\tau) = 0 \textit{ sur } \mathbb{R}^n \times \{\tau < t \le t_1\}, \textit{ pour tout } (\xi,\tau) \in \mathbb{R}^n \times [t_0, t_1[$$

et, pour tout $f \in C_0(\mathbb{R}^n)$,

$$\lim_{t \searrow \tau} \int_{\mathbb{R}^n} E(x,t;\xi,\tau) f(\xi) d\xi = f(x), \;\; x \in \mathbb{R}^n.$$

La fonction de Green-Neumann associée à un opérateur parabolique du second ordre peut s'exprimer de manière explicite grâce à la méthode des paramétrices. Son expression explicite fait intervenir la solution fondamentale associée au même opérateur parabolique. Afin d'obtenir des estimations de la fonction de Neumann Green asociée à un opérateur parabolique du second ordre, nous avons d'abord dû nous intéresser aux estimations de la solution fondamentale associée au même opérateur.

En 1958, Nash a publié un travail fondamental [41] sur la continuité locale de type Hölder des solutions d'équations paraboliques du second ordre.

Dans l'appendice de cet important papier, Nash prouve l'existence d'une borne inférieure et d'une borne supérieure pour la solution fondamentale E d'une équation parabolique sous forme divergentielle :

$$\partial_t u - \partial_j(a_{ij}(x,t)\partial_i u) = 0.$$

Plus précisément, il prouve des inégalités de la forme suivante :

$$E(x,t,\xi,\tau) \le k(t-\tau)^{-n/2} \exp[-k|x-\xi|(t-\tau)^{-1/2} \log(k|x-\xi|(t-\tau)^{-1/2})]$$

et, pour tout $\varepsilon > 0$,

$$E(x,t,\xi,\tau) \ge k_1(t-\tau)^{-n/2} \exp[-k_2(|x-\xi|/(t-\tau)^{1/2})^{2+\varepsilon}],$$

où k_1 et k_2 sont des constantes qui dépendent de ε.
Le premier à avoir obtenu des estimations gaussiennes pour la solution fondamentale associée à un opérateur parabolique du second ordre est Aronson dans son article [1].

Aronson a considéré sur $\mathbb{R}^n \times (0,T)$ l'équation parabolique :

$$\partial_t u - \partial_j(a_{ij}(x,t)\partial_i u + a_j(x,t)u) - b_j(x,t)\partial_j u - c(x,t)u = 0,$$

avec des coefficients supposés réguliers.

Afin d'obtenir des estimations gaussiennes pour la solution fondamentale E associée à cette équation, Aronson a utilisé l'inégalité d'Harnack et les inégalités, prouvées par Nash, suivantes :

$$\int_{\mathbb{R}^n} E^2(x,t,\xi,\tau)d\xi \leq k(t-\tau)^{-n/2},$$

$$\int_{\mathbb{R}^n} E^2(x,t,\xi,\tau)dx \leq k(t-\tau)^{-n/2},$$

et

$$E(x,t,\xi,\tau) \leq k(t-\tau)^{-n/2}.$$

Il a ainsi obtenu l'existence de constantes α_1, α_2 et K telles que :

$$K^{-1}\gamma_1(x-\xi,t-\tau) \leq E(x,t,\xi,\tau) \leq K\gamma_2(x-\xi,t-\tau)$$

pour tous (x,t), $(\xi,\tau) \in \mathbb{R}^n \times (0,T)$ avec $t > \tau$, où γ_i est la solution fondamentale de $\alpha_i \Delta u = \partial_t u$ pour $i = 1, 2$.

Dans [27], Fabes et Stroock ont étudié des opérateurs paraboliques sous forme divergentielle de la forme

$$L = \partial_i(a_{ij}(x,t)\partial_j) - \partial_t,$$

où les coefficients a_{ij} sont réguliers.

Fabes et Stroock ont obtenu les estimations suivantes :

$$\frac{\exp\left[-C\frac{|x-\xi|^2}{t-\tau}\right]}{C(t-\tau)^{-n/2}} \leq E(x,t,\xi,\tau) \leq \frac{C\exp\left[-\frac{|x-\xi|^2}{C(t-\tau)}\right]}{(t-\tau)^{-n/2}},$$

pour tous $\tau < t$ et pour tous $x, \xi \in \mathbb{R}$.

Notons que pour obtenir la majoration gaussienne, Fabes et Stroock utilisent une méthode classique également utilisée par Daners dans [22] et par Ouhabaz dans [42] pour obtenir une majoration gaussienne pour la fonction de Green Neumann associée à un opérateur parabolique du second ordre. Cette méthode consiste à conjuguer l'opérateur $A_t = \partial_i(a_{ij}(x,t)\partial_j)$ de façon à travailler sur l'opérateur $A_t^\Psi = \exp(-\Psi)A_t\exp(\Psi)$ (méthode de perturbation initiée par Davies [24]), puis à obtenir une estimation de type $L_2 - L_\infty$ pour le système d'évolution associé à A_t^Ψ et à en déduire une estimation du type $L_1 - L_2$ pour le système d'évolution associé à l'opérateur adjoint. Ceci permet d'obtenir une estimation du type $L_1 - L_\infty$ pour le système d'évolution associé à A_{2t}^Ψ. Cette estimation permet d'obtenir la majoration gaussienne souhaitée.

Pour la minoration gaussienne, Fabes et Stroock démontrent d'abord une borne inférieure de type Nash pour E :

$$\int e^{-\pi|\xi|^2}\log E(x,1,\xi,0)d\xi \geq -B,$$

pour tout $|x| \leq 1$.

Cette inégalité leur permet d'obtenir la minoration suivante pour E :

$$E(x,t,\xi,\tau) \geq \frac{1}{C(t-\tau)^{n/2}},$$

pour tous x et ξ vérifiant $|x-\xi| \leq \sqrt{t-\tau}$.

Ensuite, ils en déduisent de façon classique la minoration gaussienne en utilisant la positivité et la propriété de reproduction de E.

Notons que leur démonstration des estimations gaussiennes de E n'utilise ni la continuité locale de type Hölder de E, ni l'inégalité de Moser-Harnack. Par contre, Fabes et Stroock montrent que l'on peut déduire ces deux résultats des estimations gaussiennes de E.

De nombreux autres auteurs ont travaillé sur ce sujet. Nous pouvons citer Kalashnikav et Oleinik [33] qui ont prouvé que $E \geq C(t-\tau)^{-n/2}$ sur le paraboloïde $|x-\xi|^2 \leq C(t-\tau)$.

Nous pouvons également citer Besala [5] et Friedman [28] qui ont obtenu des bornes inférieures pour E lorsque $t-\tau$ est borné loin de zéro.

Notons enfin que Eidel'man et Porper [26] ont obtenu une minoration et une majoration gaussiennes pour E lorque les coefficients de L satisfont la condition de Dini uniforme par rapport à x.

1.2.2 Construction de la fonction de Green-Neumann sur un ouvert de $\mathbb{R}^n$

Soient Ω un domaine borné de $\mathbb{R}^n$ et $t_0 < t_1$. Pour $\tau \in [t_0, t_1[$, posons $Q_\tau = \Omega \times (\tau, t_1)$, $\Sigma_\tau = \partial\Omega \times (\tau, t_1)$ et considérons le problème avec condition de Neumann au bord (noté PN dans la suite) associé à l'opérateur L :

$$\begin{cases} Lu = 0 & \text{sur } Q_\tau, \\ u(\cdot\,,\tau) = \psi & \text{sur } \Omega, \\ \partial_\nu u = 0 & \text{sur } \Sigma_\tau. \end{cases} \tag{1.1}$$

Ici, L est un opérateur différentiel du second ordre

$$L = a_{ij}(x,t)\partial^2_{ij} + b_k(x,t)\partial_k + c(x,t) - \partial_t,$$

où les coefficients a_{ij}, bi, c sont définis sur $Q = \Omega \times (t_0, t_1)$, et la matrice $a_{ij}(x,t)$ est symétrique pour tout $(x,t) \in Q$.

Nous supposerons également que la condition d'ellipticité suivante est vérifiée :

$$a_{ij}(x)\xi_i\xi_j \geq \lambda|\xi|^2, \ \ \forall (x,t) \in Q, \ \xi \in \mathbb{R}^n.$$

D'après Friedman [28], sous certaines conditions de régularité des coefficents de L et du domaine Ω, pour tout $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$, le PN (1.1) a une unique solution $u \in C^{1,0}(\overline{Q}_\tau) \cap C^{2,1}(Q_\tau)$ donnée par

$$u(x,t) = \int_\tau^t \int_{\partial\Omega} E(x,t;\xi,\sigma)\varphi(\xi,\sigma)d\xi d\sigma + \int_\Omega E(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi. \tag{1.2}$$

Ici

$$\varphi(x,t) = F_\tau(x,t) - 2\sum_{\ell\geq 1}\int_\tau^t \int_{\partial\Omega} M_\ell(x,t;\xi,\sigma)F_\tau(\xi,\sigma)d\xi d\sigma, \tag{1.3}$$

avec

$$\begin{aligned} &F_\tau(x,t) = -2\int_\Omega \partial_\nu E(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi, \\ &M_1 = -2\partial_\nu E, \\ &M_{\ell+1}(x,t;\xi,\tau) = \int_\tau^t \int_{\partial\Omega} M_1(x,t;\eta,\sigma)M_\ell(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma. \end{aligned}$$

Pour $(x,t) \in \Sigma_\tau$ et $\xi \in \Omega$, posons

$$\mathcal{N}(x,t;\xi,\tau) = -2\partial_\nu E(x,t;\xi,\tau) - 2\sum_{\ell \geq 1} \int_\tau^t \int_{\partial\Omega} M_\ell(x,t;\eta,\sigma)\partial_\nu E(\eta,\sigma;\xi,\tau) d\eta d\sigma.$$

Nous avons

$$\varphi(x,t) = \int_\Omega \mathcal{N}(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi. \tag{1.4}$$

Nous posons

$$G(x,t,\xi,\tau) = \int_\tau^t \int_{\partial\Omega} E(x,t;\eta,\sigma)\mathcal{N}(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma + E(x,t;\xi,\tau). \tag{1.5}$$

D'après le théorème de Fubini, nous avons

$$u(x,t) = \int_\Omega G(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi. \tag{1.6}$$

La fonction G est appelée fonction de Green-Neumann associée à l'équation $Lu = 0$ sur Q.

1.2.3 Majoration de la fonction de Green-Neumann sur un ouvert de $\mathbb{R}^n$

Dans [22], Daners a considéré le PN suivant :

$$\begin{cases} Lu = 0 & \text{sur } \Omega \times (0,\infty), \\ u(\cdot\,,0) = \psi & \text{sur } \Omega, \\ B(t)u = 0 & \text{sur } \partial\Omega \times (0,\infty). \end{cases} \tag{1.7}$$

Ici, l'opérateur parabolique L est de la forme $L = A(t)u - \partial_t u$, avec A un opérateur sous forme divergentielle ayant des coefficients L^∞ :

$$A(t)u = \partial_i(a_{ij}(x,t)\partial_j u + a_i(x,t)u) + b_i(x,t)\partial_i u + c_0(x,t)u$$

et

$$B(t)u = (a_{ij}(x,t)\partial_j u + a_i(x,t)u)\partial_i.$$

Daners a montré que si le domaine satisfait une condition de cône intérieur, alors

$$|G(x,t,\xi,\tau)| \leq C(t-\tau)^{-n/2} e^{\omega(t-\tau)} e^{-|x-\xi|^2/(c(t-\tau))},$$

pour tous $x, \xi \in \Omega$ et $t > \tau$.

Pour démontrer cela, Daners obtient d'abord des estimations de type L^p pour le système d'évolution U associé à l'opérateur A en utilisant l'ellipticité de (a_{ij}).

Ensuite, il obtient une estimation du type $L^2 - L^\infty$ en utilisant les inégalités de Nash suivantes qui nécessitent la condition de cône intérieur du domaine

$$||u||_2^2 \leq K_\Omega\big(\varepsilon||u||^2_{W_2^1(\Omega)} + \varepsilon^{-N/2}K_0||u||_1^2\big)$$

et

$$||u||_2^{2+4/N} \le K_\Omega^{1+2/N} K_1 ||u||^2_{W_1^2(\Omega)} ||u||_1^{4/N}$$

pour tout $\varepsilon > 0$ et pour tout $u \in W_2^1(\Omega) \cap L_1(\Omega)$.
Ensuite, par dualité, il obtient une estimation de type $L^1 - L^2$ pour le système d'évolution rétrograde Tout ceci permet d'obtenir une majoration de type $L^1 - L^\infty$ pour le système d'évolution U.
Enfin, en conjuguant le système d'évolution, il obtient une majoration gaussienne pour la fonction de Green-Neumann de l'opérateur parabolique associé au système.
Notons également que Choi et Kim [13] ont obtenu une majoration gaussienne pour un système d'opérateurs sous forme divergentielle sous la condition que le PN possède une estimation de type De Giorgio-Nash-Moser au bord.
Notons enfin que dans [8], Burdzy, Chen et Sylvester ont établi une majoration gaussienne pour la fonction de Neumann Green sur un domaine dépendant du temps.

Dans le cas où les coefficients de L sont indépendants du temps, la fonction de Green-Neumann n'est rien d'autre qu'un noyau de la chaleur.
Il existe une riche littérature sur les majorations gaussiennes pour les noyaux de la chaleur. Citons par exemple le livre classique de Ouhabaz [42]. Dans ce livre, on trouve un résultat de majoration gaussienne pour le noyau de la chaleur associé à la forme sesquilinéaire

$$a(u,v) = \int_\Omega [\sum_{k,j=1}^n a_{kj}\partial_k u \bar{\partial_j} v + \sum_{k=1}^n (b_k \bar{v} \partial_k u + c_k u \bar{\partial_k} v) + a_0 u \bar{v}] dx$$

ayant pour domaine $D(a) = H^1(\Omega)$, où Ω est un ouvert de $\mathbb{R}^n$ et où les coefficients de a sont $L^\infty(\Omega, \mathbb{C})$.
Comme dans l'article de Daners [22], la technique consiste à obtenir, en utilisant l'inégalité de Sobolev, des estimations en norme L^p. Puis, grâce au théorème de Riesz-Thorin, l'auteur en déduit une estimation en norme $L^2 - L^\infty$ du semi-groupe e^{-tA}, où A est l'opérateur associé à la forme sesquilinéaire a. Ensuite, par dualité, il obtient une estimation en norme $L^1 - L^2$ du semi-groupe e^{-tA}, ce qui nous permet d'obtenir une estimation en norme $L^1 - L^\infty$ du semi-groupe e^{-tA}. Ceci permet d'obtenir une majoration du noyau de la chaleur p associé à a :

$$|p(t,x,\xi)| \le C_\varepsilon t^{-n/2} e^{-s(A)t} [1 + c' t]^{n/2},$$

pour tous $t > 0$ et $\varepsilon > 0$ et où $s(A) = \inf\{\Re(a(u,u)),\ u \in H^1(\Omega) \text{ et } ||u||_2 = 1\}$.
Enfin, en conjuguant le semi-groupe e^{-tA} (technique de perturbation de E.B. Davies), l'auteur obtient une majoration gaussienne du noyau de la chaleur

$$|p(t,x,\xi)| \le C_\varepsilon t^{-n/2} e^{c't} \exp[-\frac{|x-\xi|^2}{c'' t}],$$

pour tous $\varepsilon > 0$, $t > 0$ et pour presque tout $(x,\xi) \in \Omega \times \Omega$.
Nous pouvons également citer le livre de Davies [24] dans lequel il y a également des résultats de majoration gaussienne de noyaux de la chaleur.

Remark 1.2.1. Le problème est différent dans le cas d'une condition de Dirichlet au bord. En effet, la fonction de Green-Dirichlet s'annule au bord. Par conséquent, en utilisant le principe du maximum parabolique, on peut montrer que la fonction de Green-Dirichlet est positive et majorée point par point par la solution fondamentale associée au même opérateur parabolique sur l'espace tout entier. Ceci implique que la fonction de Dirichlet Green admet une majoration gaussienne.

1.2.4 Minoration de la fonction de Green-Neumann

A notre connaissance, une minoration gaussienne pour la fonction de Neumann Green dans le cas d'un opérateur parabolique général n'a jamais été démontrée précédemment.

Même dans le cas d'un opérateur parabolique dont les coefficients ne dépendent pas du temps, nous ne pouvons citer que trois références.

Dans [18], Choulli, Ouhabaz et Yamamoto ont obtenu une minoration gaussienne pour le noyau de la chaleur de type Neumann, lorsque L est l'opérateur de Laplace.

Pour obtenir ce résultat, ils démontrent tout d'abord une minoration sur la diagonale :

$$p(t,x,x) \geq Ct^{-n/2} \text{ pour tous } t > 0 \text{ et } x \in \Omega$$

Cette estimation est obtenue en utilisant la majoration gaussienne de p loin de la diagonale, ainsi que la propriété de semi-groupe de $e^{t\Delta_N}$.

Ensuite, ils obtiennent une minoration du type $p(t,x,\xi) \geq ct^{-n/2}$ pour $0 < t < T$ et $|x-\xi| \leq \delta\sqrt{t}$. Pour démontrer cela, le point clé est la continuité de type Hölder de $x \to K(x,\xi,t)$ qui repose sur le fait que $\mu - \Delta_N$ et un isomorphisme de $H^s(\Omega)$ sur $H^{s-2}(\Omega)$, pour μ grand et $s > n/2+1$.

Enfin, de manière classique (cf [20], [24], [42]), ils passent de la minoration précédente à la minoration gaussienne en utilisant la propriété de semi-groupe et la positivité du noyau. Les auteurs obtiennent ainsi le résultat suivant :

$$p(t,x,\xi) \geq Ct^{-n/2}e^{-C\frac{|x-\xi|^2}{t}}, \text{ pour tous } \ x,\xi \in \Omega,\ 0 < t \leq T.$$

En examinant la preuve, il est intéressant de remarquer que le résultat de minoration gaussienne présent dans [18] peut être étendu aux opérateurs sous forme divergentielle avec des coefficients $\mathcal{C}^\infty$.

Nous pouvons également citer Chavel [10], qui a obtenu un résultat de minoration gaussienne pour un opérateur parabolique avec coefficients indépendants du temps, dans le cas où le domaine est convexe.

Citons enfin Li et Yau [36, theorem 4.2 page 184] qui ont également obtenu une minoration gaussienne pour le noyau de la chaleur, dans le cas d'une variété Riemannienne compacte à bord convexe et ayant une courbure de Ricci non négative.

Remark 1.2.2. Le problème est différent dans le cas où la condition au bord est une condition de Dirichlet. En effet, la fonction de Green-Dirichlet s'annule au bord.

Aronson [2, Theorem 8 page 670] a établi une minoration gaussienne intérieure pour une fonction de Dirichlet Green.

Plus tard, Cho [11], Cho, Kim et Park [12] ont étendu ce résultat à une minoration gaussienne à poids globale impliquant la distance au bord.

Lorsque la distance euclidienne est changée en une distance géodesique, une minoration gaussienne pour la fonction de Green-Dirichlet a été démontrée par Van den Berg [47] [48].

1.2.5 Estimations gaussiennes du noyau de la chaleur d'une variété sans bord

Soit $\mathcal{M}$ une variété complète sans bord de dimension n, de courbure de Ricci non négative, munie de la distance géodésique d.

Dans [24], E.B. Davies a obtenu des estimations gaussiennes pour le noyau de la chaleur de semi-groupe e^{-tH}, où H est l'opérateur de Laplace-Beltrami sur $\mathcal{M}$.

Davies a tout d'abord montré que e^{-tH} peut être étendu à un semi-groupe positif et contractant sur $L^p(\mathcal{M})$ pour tout $1 \leq p \leq \infty$, et que sur $L^2(\mathcal{M})$, ce semi-groupe possède un noyau K strictement positif et $\mathcal{C}^\infty$.

En utilisant l'inégalité de Harnack obtenue par Li et Yau dans [36], Davies obtient qu'il existe une constante $c > 0$ telle que :

$$0 < K(t,x,x) \leq c|B(x,t^{1/2})|^{-1},$$

pour tout $t > 0$ et tout $x \in \mathcal{M}$.

Par une méthode de perturbation, Davies en déduit le théorème de majoration gaussienne pour le noyau de la chaleur ci-dessous.

Theorem 1.2.1. *Si $\mathcal{M}$ est une variété complète ayant une courbure de Ricci non-négative, alors, pour tout $\delta > 0$, il existe une constante $c_\delta > 0$ telle que*

$$0 < K(t,x,y) \leq c_\delta |B(x,t^{1/2})|^{-\frac{1}{2}} |B(y,t^{1/2})|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-d(x,y)^2}{4(1+\delta)t}\right),$$

pour tout $t > 0$ et pour tous $x, y \in \mathcal{M}$.

Grâce à cette majoration gaussienne, Davies obtient la minoration suivante pour le noyau K :

$$K(t,x,y) \geq (4\pi t)^{-n/2} \exp\left(-\frac{d(x,y)^2}{4t}\right),$$

pour tous $x, y \in \mathcal{M}$ et pour tout $t > 0$.

Grâce à ce résultat et après avoir montré l'existence d'une constante $a \geq 1$ telle que :

$$\int_{d(x,y) \leq a t^{\frac{1}{2}}} K(t,x,y)dy \geq \frac{1}{2},$$

Davies obtient le théorème de minoration gaussienne ci-dessous.

Theorem 1.2.2. *Soit $\mathcal{M}$ une variété Riemanienne complète de dimension n avec une courbure de Ricci non négative. Pour tout $0 < \delta < 1$, il existe une constante b_δ telle que le noyau de la chaleur de $\mathcal{M}$ vérifie*

$$K(t,x,y) \geq b_\delta |B(x,t^{\frac{1}{2}})|^{-1} \exp\left(-\frac{d(x,y)^2}{4(1-\delta)t}\right),$$

pour tout $t > 0$ et tous $x, y \in \mathcal{M}$.

En utilisant une méthode similaire, E.B. Davies obtient également dans [23] deux résultats de majoration gaussienne pour le noyau de la chaleur d'une variété Riemanienne dont la courbure de Ricci est seulement minorée par un réel strictement négatif.

Dans [23], E.B. Davies suppose que la variété Riemannienne de dimension n, notée $\mathcal{M}$, a une courbure de Ricci telle que $Ric(x) \geq -(n-1)\beta^2$.

Il obtient d'une part que, pour tout $0 < t < 1$, pour tous $x, y \in \mathcal{M}$ et pour tout $\delta > 0$, il existe une constante c_δ telle que

$$0 \leq K(t,x,y) \leq c_\delta |B(x,t^{1/2})|^{-\frac{1}{2}} |B(y,t^{1/2})|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-d(x,y)^2}{4(1+\delta)t}\right).$$

Il obtient d'autre part que, pour tout $1 \leq t < \infty$, pour tous $x, y \in \mathcal{M}$ et pour tout $\delta > 0$, il existe une constante c_δ telle que

$$0 \leq K(t,x,y) \leq c_\delta |B(x,1)|^{-\frac{1}{2}} |B(y,1)|^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{-d(x,y)^2}{4(1+\delta)t}\right) \exp\left((\delta - E)t\right),$$

avec $E \geq 0$ la borne inférieure du spectre de l'opérateur $-\Delta$. (E est un invariant global de la variété Riemanienne $\mathcal{M}$).

Notons que dans [36], P. Li et S. T. Yau avaient, antérieurement à E.B. Davies, démontré les résultats de majoration et minoration gaussienne pour le noyau de la chaleur, dans le cas où la variété Riemanienne possède une courbure de Ricci non négative. Mais leur méthode ne donne pas de très bons résultats quand on veut l'étendre au cas des variétés Riemaniennes dont la courbure de Ricci est seulement minorée par un réel strictement négatif.

1.2.6 Noyau de la chaleur et inégalités classiques

Considèrons une variété Riemanienne connexe, complète et non compacte (M, d, μ), où d est la distance géodésique et μ la mesure Riemanienne. On note $V(x,r) := \mu(B(x,r))$ le volume de la boule géodésique $B(x,r)$ de centre $x \in M$ et de rayon $r > 0$.

Nous assumons en outre que M vérifie la propriété de doublement de volume (notée (VD) dans la suite), c'est-à-dire qu'il existe une constante $C > 0$ telle que :

$$V(x, 2r) \leq CV(x,r), \quad \forall x \in M,\ r > 0.$$

Sous cette condition, le noyau de la chaleur de l'opérateur de Laplace-Beltrami p vérifie la majoration sur la diagonale (notée (DUE)) suivante :

$$p(t,x,x) \leq \frac{C}{V(x,\sqrt{t})}, \quad \forall t > 0,\ x \in M.$$

Cette estimation est vérifiée en particulier pour les variétés ayant une courbure de Ricci non négative (cf [36]).

Sous la condition (VD) sur M, la majoration sur la diagonale (DUE) est équivalente à la majoration gaussienne (notée (UE)) (cf [31, Theorem 1.1] et [21, Corollary 4.6]) :

$$p(t,x,y) \leq \frac{C}{V(x,\sqrt{t})} \exp\left(-\frac{d^2(x,y)}{Ct}\right), \ \forall t > 0,\ x, y \in M$$

Dans [30], Grigor'yan a démontré que sous l'hypothèse de doublement de volume (VD) pour M, la majoration sur la diagonale (DUE) est équivalente à l'inégalité relative de Faber-Krahn (notée (FK) dans la suite) suivante : il existe $c > 0$ tel que, pour toute boule $B(x,r)$ de M et tout ouvert $\Omega \subset B(x,r)$:

$$\lambda_1(\Omega) \geq \frac{c}{r^2}\left(\frac{V(x,r)}{\mu(\Omega)}\right)^{\alpha},$$

où c et α sont des constantes positives et $\lambda_1(\Omega)$ la plus petite valeur propre de l'opérateur non négatif de Laplace-Beltrami.

Notons que la preuve que (FK) implique (DUE) est difficile et nécessite l'utilisation de l'inégalité de la moyenne ("mean value inequality") pour les solutions de l'équation de la chaleur ainsi que l'utilisation du principe du maximum intégré ("integrated maximum principle").

Par ailleurs, la majoration sur la diagonale (DUE) est équivalente à l'inégalité de Sobolev localisée (notée (LS_q)) pour un $q > 2$: il existe une constante $C > 0$ telle que, pour toute boule $B = B(x,r)$ dans M et pour tout $f \in \mathcal{C}_0^\infty(B)$:

$$\left(\int_B |f|^q d\mu\right)^{\frac{2}{q}} \leq \frac{Cr^2}{V^\alpha(x,r)}\int_B (|\nabla f|^2 + r^{-2}|f|^2)d\mu.$$

Notons que dans [44] et [45], Saloff-Coste a démontré que (LS_q) implique (DUE). Et Saloff-Coste et Hebisch ont démontré dans [32] que (DUE) implique (LS_q).

Par ailleurs, notons $\mathcal{E}(f) := ||\nabla f||_2^2$ et considérons l'inégalité de Nash (N) :

$$||f||_2^2 \leq C(||fV_r^{-1/2}||_1^2 + r^2\mathcal{E}(f)), \;\; \forall r > 0,\; f \in \mathcal{C}_0^\infty(M).$$

Dans [6], Boutayeb, Coulhon et Sikora ont montré que la majoration sur la diagonale (DUE) est équivalente à l'inégalité de Nash (N).

Par ailleurs, considérons l'inégalité de Nash localisée (LN_α) pour $\alpha > 0$: il existe une constante $C > 0$ telle que

$$\left(\int_B |f|^2 d\mu\right)^{1+\alpha} \leq \frac{Cr^2}{V^\alpha(x,r)}\left(\int_B |f| d\mu\right)^{2\alpha}\int_B (|\nabla f|^2 + r^{-2}|f|^2)d\mu,$$

Gilles Carron a montré que (N) est équivalente à (LN_α) pour un $\alpha > 0$.

Enfin, considérons pour $q > 2$ l'inégalité de Gagliardo-Nirenberg (GN_q) :

$$||fV_r^{\frac{1}{2}-\frac{1}{q}}||_q^2 \leq C(||f||_2^2 + r^2\mathcal{E}(f)), \;\; \forall r > 0,\; f \in \mathcal{C}_0^\infty(M)$$

Dans [6], Boutayeb, Couhlon et Sikora ont également montré que l'inégalité de Sobolev localisée et l'inégalité de Gagliardo-Nirenberg sont toutes deux équivalentes à la majoration sur la diagonale (DUE) pour tout réel $q \in]2, +\infty]$ tel que $\frac{q-2}{q}\kappa < 2$. Ici κ désigne un réel tel que $V(x,r) \leq C\left(\frac{r}{s}\right)^\kappa V(x,s)$ pour tous $r \geq s > 0$, pour tout $x \in \mathcal{M}$ et pour une constante C. Notons que l'existence de κ découle de la propriété de doublement de volume (VD).

En résumé, quand M vérifie (VD), la majoration gaussienne (UE) est équivalente aux inégalités de Nash (N), Nash localisée (LN_α) pour un $\alpha > 0$, de Sobolev localisée (LS_q) et de Gagliardo-Nirenberg (GN_q) pour tout réel $q \in]2, +\infty]$ tel que $\frac{q-2}{q}\kappa < 2$.

Considèrons maintenant (M,μ) un espace mesuré, avec μ σ-finie. On considère L un opérateur auto-adjoint non négatif agissant sur $L^2(M,\mu)$ ayant un domaine dense noté $\mathcal{D}$.

Définissons la forme quadratique $\mathcal{E}$ associée à L par :

$$\mathcal{E}(f) :=< Lf, f >= ||L^{1/2}f||_2^2 \quad \forall f \in \mathcal{D},$$

où $< .,. >$ est le produit scalaire sur $L^2(M,\mu)$.

Notons $\mathcal{F}$ le domaine de définition de $\mathcal{E}$, qui est usuellement plus grand que $\mathcal{D}$.

Notons que par théorie spectrale, l'opérateur $-L$ génère un semi-groupe analytique contractant $(e^{-tL})_{t>0}$ sur $L^2(M,\mu)$.

Soit $v(x,r)$ une fonction de $x \in M$ et $r > 0$, mesurable en x, finie et positive presque partout, et non décroissante en r pour presque tout x fixé.

Supposons que v est doublant (noté (D_v)), au sens qu'il existe une constante $C > 0$ telle que

$$v(x,2r) \leq Cv(x,r),\ \forall r > 0,\ \mu\text{-p.p.}\, x \in M.$$

Notons que (D_v) implique l'existence de constantes C et κ_v telles que l'inégalité $(D_v^{\kappa_v})$ suivante est vérifiée :

$$v(x,r) \leq C\left(\frac{r}{s}\right)^{\kappa_v} v(x,s),\ \forall r \geq s > 0,\ \mu\text{-p.p.}\, x \in \mathcal{M}.$$

Faisons une hypothèse supplémentaire sur v, notée (D'_v) :

$$v(y,r) \leq Cv(x,r),\ \forall x,y \in M,\ r > 0,\ d(x,y) \leq r.$$

Définissons également v_r de la façon suivante :

$$v_r(x) := v(x,r),\ r > 0,\ x \in M.$$

Définissons l'inégalité de type v-Nash, notée (N^v), suivante :

$$||f||_2^2 \leq C(||fv_r^{-1/2}||_1^2 + r^2\mathcal{E}(f)),\ \forall r > 0,\ f \in \mathcal{F}.$$

Pour $2 < q \leq +\infty$, définissons également l'inégalité de type v-Gagliardo-Nirenberg, notée (GN_q^v), suivante :

$$||fv_r^{\frac{1}{2}-\frac{1}{q}}||_q^2 \leq C(||f||_2^2 + r^2\mathcal{E}(f)),\ \ \forall r > 0,\ f \in \mathcal{F}.$$

Munissons (M,μ) d'une métrique d. Nous dirons que l'opérateur L vérifie sur (M,μ,d) l'estimation de Davies-Gaffney (DG) si :

$$| < e^{-tL}f_1, f_2 > | \leq \exp\left(-\frac{r^2}{4t}\right)||f_1||_2||f_2||_2,$$

pour tout $t > 0$, pour tous ouverts U_1 et U_2 inclus dans M, pour tous f_1 et f_2 appartenant à $L^2(U_i,\mu)$, où $r = d(U_1,U_2)$.

Notons que l'estimation de Davies-Gaffney est en particulier vérifiée pour l'essentiel des opérateurs différentiels auto-adjoints, elliptiques ou sous-elliptiques du second ordre (incluant en particulier l'opérateur de Laplace-Beltrami) sur un variété Riemanienne complète, les opérateurs de Schrödinger à potentiel réel et les champs électromagnétiques (cf [21]).

Enfin, nous dirons que (M, μ, L, v) vérifie (DUE^v) si $(e^{-tL})_{t>0}$ admet un noyau de la chaleur p mesurable et si

$$|p(t,x,y)| \leq \frac{C}{\sqrt{v(x,\sqrt{t}), v(y,\sqrt{t})}},$$

pour tout $t > 0$ et pour presque tous $x, y \in M$.

Notons que, d'après [21], si L vérifie l'estimation de Davies-Gaffney (DG) et si les conditions (D_v) et (D'_v) sont vérifiées, alors (DUE^v) est équivalente à la condition (UE^v) qui demande l'existence d'un noyau de la chaleur p mesurable pour $(e^{-tL})_{t>0}$ vérifiant

$$|p(t,x,y)| \leq \frac{C'}{v(x,\sqrt{t})} \exp\left(-\frac{d^2(x,y)}{Ct}\right),$$

pour tout $t > 0$ et pour presque tous $x, y \in M$.

Dans [6], Boutayeb, Coulhon et Sikora ont obtenu que si (M, d, μ) est un espace mesuré métrique doublant, si $v : M \times \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$ vérifie (D_v) et (D'_v), si L est un opérateur non négatif auto-adjoint sur $L^2(M, \mu)$, si L satisfait l'estimation de Davies-Gaffney (DG) et si $(e^{-tL})_{t>0}$ préserve la positivité et est uniformément borné sur $L^1(M, \mu)$, alors la majoration gaussienne (UE^v) est équivalente à la majoration de type v-Nash (N^v) et à la majoration de type v-Gagliardo-Nirenberg (GN^v_q) pour tout réel $q \in]2, +\infty]$ tel que $\frac{q-2}{q}\kappa_v < 2$, où κ_v est définit comme dans $D_v^{\kappa_v}$.

1.3 Estimations gaussiennes : nos résultats

1.3.1 Estimations gaussiennes de la solution fondamentale

Dans notre article [14], nous avons considéré l'opérateur différentiel du second ordre

$$L = a_{ij}(x,t)\partial^2_{ij} + b_k(x,t)\partial_k + c(x,t) - \partial_t,$$

où les coefficients a_{ij}, b_i et c sont définis sur $P = \mathbb{R}^n \times (t_0, t_1)$ avec $t_0 < t_1$.

Nous avons fait les hypothèses suivantes sur les coefficients de L :

$$\begin{aligned} &(i)\ a_{ij} \in W^{1,\infty}(P),\ \ b_k,\ c \in C([t_0,t_1], C^1(\mathbb{R}^n)),\\ &(ii)\ \|a_{ij}\|_{W^{1,\infty}(P)} + \|b_k\|_{L^\infty(P)} + \|c\|_{L^\infty(P)} \leq A, \end{aligned}$$

où $A > 0$ est une constante.

Nous avons supposé que la matrice $a_{ij}(x,t)$ est symétrique pour tout $(x,t) \in P$.

Nous avons également supposé que la condition d'ellipticité suivante est vérifiée :

$$a_{ij}(x)\xi_i\xi_j \geq \lambda|\xi|^2,\ \ (x,t) \in P,\ \xi \in \mathbb{R}^n.$$

Pour obtenir des estimations de la solution fondamentale E associée à L, nous avons utilisé la construction explicite de la solution fondamentale par la méthode des paramétrices. Cette méthode a été initiée par Levi [35].

Soient $a = (a^{ij})$ la matrice inverse de (a_{ij}), $|a|$ le déterminant de a et

$$Z(x,t;\xi,\tau) = [4\pi(t-\tau)]^{-n/2}\sqrt{|a(\xi,\tau)|}e^{-\frac{a(\xi,\tau)(x-\xi)\cdot(x-\xi)}{4(t-\tau)}}, \ \ (x,t;\xi,\tau) \in P^2 \cap \{t > \tau\}.$$

Cette fonction est appelée la paramétrice. Elle vérifie

$$L_0 Z(\cdot\,,\cdot\,,\xi,\tau) = 0 \text{ sur } \mathbb{R}^n \times \{\tau < t \leq t_1\} \text{ pour tout } (\xi,\tau) \in \mathbb{R}^n \times [t_0, t_1[, \tag{1.1}$$

où

$$L_0 = a_{ij}(\xi,\tau)\partial^2_{ij} - \partial_t.$$

Par cette méthode, on obtient une expression de la solution fondamentale de $Lu = 0$ sur P de la forme

$$E(x,t;\xi,\tau) = Z(x,t;\xi,\tau) + \int_\tau^t \int_{\mathbb{R}^n} Z(x,t;\eta,\sigma)\Phi(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma, \tag{1.2}$$

où la fonction Φ est donnée par la série

$$\Phi = \sum_{\ell=1}^{\infty} \Phi_\ell,$$

où $\Phi_1(x,t;\xi,\tau) = LZ(x,t;\xi,\tau)$ et

$$\Phi_{\ell+1}(x,t;\xi,\tau) = \int_\tau^t \int_{\mathbb{R}^n} \Phi_1(x,t;\eta,\sigma)\Phi_\ell(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma, \ \ \ell \geq 1.$$

Nous avons montré que

$$\left| \int_\tau^t \int_{\mathbb{R}^n} Z(x,t;\eta,\sigma)\Phi(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma \right| \leq \widetilde{C} N(t-\tau)^{-(n-1)/2} e^{-\frac{\lambda^*|x-\xi|^2}{t-\tau} + \widetilde{C}N^2(t-\tau)}, \tag{1.3}$$

avec $N = \max(\max_k \|b_k\|_{L^\infty(P)}, \|c\|_{L^\infty(P)}, 1)$ et $\widetilde{C}$ une constante qui ne dépend pas de N.

Il y a deux conséquences de l'inégalité précédente. La première est que

$$|E(x,t;\xi,\tau)| \leq \widetilde{C}(t-\tau)^{-n/2} e^{-\frac{\lambda^*|x-\xi|^2}{t-\tau} + \widetilde{C}N^2(t-\tau)}. \tag{1.4}$$

La deuxième conséquence est qu'il existe une constante $\delta > 0$ telle que

$$E(x,t;\xi,\tau) \geq \widehat{C}(t-\tau)^{-n/2}, \ \ (x,t;\xi,\tau) \in P^2, \ t > \tau, \ \widetilde{C}|x-\xi|^2 < t - \tau \leq \delta. \tag{1.5}$$

En utilisant la positivité de E et le fait que E satisfait la propriété de reproduction

$$E(x,t;\xi,\tau) = \int_{\mathbb{R}^n} E(x,t;\eta,\sigma)E(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta, \ \ x,\xi \in \mathbb{R}^n, \ \ t_0 \leq \tau < \sigma < t \leq t_1. \tag{1.6}$$

nous obtenons que la solution fondamentale E satisfait la minoration et la majoration gaussienne

$$\mathscr{G}_C(x-\xi,t-\tau) \leq E(x,t;\xi,\tau) \leq \mathscr{G}_{\widetilde{C}}(x-\xi,t-\tau),\ (x,t;\xi,\tau) \in P^2 \cap \{t>\tau\}. \tag{1.7}$$

A l'aide de la propriété de reproduction et en utilisant la majoration

$$|E(x,t;\xi,\tau)| \leq \widetilde{C}(t-\tau)^{-n/2} e^{-\frac{\lambda^*|x-\xi|^2}{t-\tau}+\widetilde{C}N^2(t-\tau)}, \tag{1.8}$$

nous pouvons également montrer que

$$e^{-\kappa N^2(t-\tau)}\mathscr{G}_C(x-\xi,t-\tau) \leq E(x,t;\xi,\tau) \leq e^{\kappa N^2(t-\tau)}\mathscr{G}_{\widetilde{C}}(x-\xi,t-\tau), \tag{1.9}$$

avec $\kappa > 0$ constant, où $(x,t;\xi,\tau) \in (\mathbb{R}^n \times \mathbb{R})^2$.
En utilisant la même méthode que celle utilisée par Fabes et Stroock [27], nous avons pu en déduire l'inégalité de Moser-Harnack ci-dessous.

Theorem 1.3.1. *Soient $\eta, \mu, \varrho \in (0,1)$. Il existe une constante $M > 0$, telle que pour tout $(x,s) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$, tout $R > 0$ et toute fonction non négative $u \in C^{2,1}(\overline{B}(x,R) \times [s-R^2,s])$ vérifiant $Lu = 0$ on a*

$$u(y,t) \leq Mu(x,s) \ \text{ pour tout } (y,t) \in \overline{B}(x,\varrho R) \times [s-\eta R^2, s-\mu R^2].$$

1.3.2 Minoration gaussienne pour la fonction de Green-Neumann

Dans notre article [14], nous démontrons un résultat de minoration gaussienne pour la fonction de Green-Neumann associée à l'opérateur parabolique

$$L = a_{ij}(x,t)\partial^2_{ij} + b_k(x,t)\partial_k + c(x,t) - \partial_t$$

placé sur $Q = \Omega \times (t_0,t_1)$, où $t_0 < t_1$ et où Ω est domaine borné de $\mathbb{R}^n$ avec un bord $C^{1,1}$-régulier. Nous faisons les hypothèses suivantes sur les coefficients de L :

(i) la matrice $(a_{ij}(x,t))$ est symétrique pour tout $(x,t) \in \overline{Q}$,
(ii) $a_{ij} \in W^{1,\infty}(Q)$, b_k, $c \in C([t_0,t_1], C^1(\overline{\Omega}))$,
(iii) $a_{ij}(x)\xi_i\xi_j \geq \lambda|\xi|^2$, $(x,t) \in \overline{Q}$, $\xi \in \mathbb{R}^n$,
(iv) $\|a_{ij}\|_{W^{1,\infty}(Q)} + \|b_k\|_{L^\infty(Q)} + \|c\|_{L^\infty(Q)} \leq A$,

où $\lambda > 0$ et $A > 0$ sont deux constantes.
Nous étendons les coefficients sur l'espace $\mathbb{R}^n$ tout entier en des coefficients ayant la même régularité.
Nous supposons de plus que Ω satisfait la condition de chaîne. C'est-à-dire qu'il existe une constante $c > 0$ tel que pour tout couple de points x, $y \in \Omega$ et pour tout entier positif m, il existe une suite $(x_i)_{0\leq i\leq m}$ de points de Ω telle que $x_0 = x$, $x_m = y$ et

$$|x_{i+1} - x_i| \leq \frac{c}{m}|x-y|, \ \ i = 0, \ldots, m-1.$$

Cette suite $(x_i)_{0\leq i\leq m}$ est vue comme une chaîne reliant x et y.
Notons que tout convexe de $\mathbb{R}^n$ vérifie la condition de chaîne, mais qu'un domaine $\mathcal{C}^{1,1}$-régulier ne vérifie pas forcément la condition de chaîne.

Nous utilisons l'expression explicite de la fonction de Green-Neumann G :

$$G(x,t,\xi,\tau) = \int_\tau^t \int_{\partial\Omega} E(x,t;\eta,\sigma)\mathcal{N}(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma + E(x,t;\xi,\tau), \tag{1.10}$$

où E est la solution fondamentale associée au même opérateur parabolique et où $\mathcal{N}$, définit précédemment, est une fonction vérifiant la majoration donnée dans le lemme suivant :

Lemma 1.3.1. *Pour $1/2 < \mu < \frac{n}{2}$, on a*

$$|\mathcal{N}(x,t;\xi,\tau)| \leq C(t-\tau)^{-\mu}|x-\xi|^{-n+2\mu},\ (x,t) \in \Sigma_\tau,\ \xi \in \Omega,\ x \neq \xi. \tag{1.11}$$

Cette majoration est le point clé de la démonstration de la minoration gaussienne de G.
En combinant cette majoration de $\mathcal{N}$ avec les estimations suivantes de la solution fondamentale E :

$$|E(x,t;\xi,\tau)| \leq C(t-\tau)^{-\beta}|x-\xi|^{-n+2\beta},$$

pour tout $\beta > 0$, et

$$E(x,t;\xi,\tau) \geq C(t-\tau)^{-n/2},\ \ (x,t;\xi,\tau) \in P^2,\ t > \tau,\ \widehat{C}|x-\xi|^2 < t-\tau,$$

nous obtenons la minoration suivante pour la fonction de Green-Neumann

$$G(x,t;\xi,\tau) \geq C(t-\tau)^{-n/2},\ \ (x,t;\xi,\tau) \in Q^2,\ 0 < t-\tau \leq \delta,\ |x-\xi| < \widehat{C}(t-\tau)^{1/2}. \tag{1.12}$$

Ensuite, en utilisant la positivité de G et la propriété de reproduction de G :

$$G(x,t;\xi,\tau) = \int_\Omega G(x,t;\eta,\sigma)G(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta,\ \tau < \sigma < t, \tag{1.13}$$

nous arrivons à montrer le résultat suivant :

Theorem 1.3.2. *Si Ω vérifie la condition de chaîne, alors la fonction de Neumann Green G satisfait la minoration gaussienne :*

$$\mathscr{G}_C(x-\xi,t-\tau) \leq G(x,t;\xi,\tau),\ \ (x,t;\xi,\tau) \in Q^2 \cap \{t > \tau\}. \tag{1.14}$$

Notons que pour cela, nous avons eu besoin de deux propriétés du domaine : le fait qu'il possède la condition de chaîne et la propriété suivante (qui est vérifiée car le domaine est $\mathcal{C}^{1,1}$-régulier) :
Il existe deux constantes positives d et r_0 telles que, pour tout $z \in \overline{\Omega}$ et $0 < \rho \leq r_0$,

$$d\rho^n \leq |B(z,\rho) \cap \Omega|. \tag{1.15}$$

Soulignons que Choi et Kim [13] ont montré que cette condition est nécessaire pour les domaines ayant une estimation au bord de type De Giorgi-Nash-Moser.
Notons que ce résultat de minoration gaussienne pour la fonction de Green-Neumann peut être étendu à une fonction de Green-Robin, lorsque la condition au bord est de type Robin :

$$\partial_\nu u + q(x,t)u = 0 \ \text{ in } \Sigma_\tau,$$

où $q \in C(\Sigma_\tau)$.

Il est intéressant de noter que l'on peut déduire du théorème de minoration gaussienne de la fonction de Green-Neumann un principe du maximum fort. En effet, soient $\psi \in C(\overline{\Omega})$, $f \in C(\overline{Q}_\tau)$, $g \in C(\overline{\Sigma}_\tau)$ et considérons le PN

$$\begin{cases} Lu = f & \text{in } Q_\tau, \\ u(\cdot\,,\tau) = \psi & \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu u = g & \text{on } \Sigma_\tau. \end{cases} \tag{1.16}$$

Nous avons le principe du maximum fort suivant :

Corollary 1.3.1. *Supposons que $\psi \geq 0$, $f \geq 0$, $g \geq 0$ et qu'au moins une des fonctions ψ, f et g n'est pas identiquement nulle. Si $u \in C^{0,1}(\overline{Q}_\tau) \cap C^{2,1}(Q_\tau)$ est la solution au PN, alors*

$$u > 0 \text{ in } \Omega \times]\tau, t_1].$$

Dans notre article [14], nous avons également considéré le cas autonome, c'est-à-dire le cas où les coefficients de L ne dépendent pas du temps. Pour un opérateur parabolique ayant des coefficients indépendants du temps, une fonction de Green-Neumann n'est rien d'autre qu'un noyau de la chaleur. Dans notre article, nous avons considéré un opérateur parabolique de la forme

$$\mathcal{L} = \partial_j(a_{ij}(x)\partial_i\,\cdot\,) + b_k(x)\partial_k + c(x) - \partial_t, \tag{1.17}$$

qui vérifie les hypothèses suivantes :

(i') la matrice $(a_{ij}(x))$ est symétrique pour tout $x \in \overline{\Omega}$,

(ii') $a_{ij} \in W^{1,\infty}(\Omega)$, $\partial_k a_{ik}$, b_k, $c \in C^1(\overline{\Omega})$,

(iii') $a_{ij}(x)\xi_i\xi_j \geq \lambda|\xi|^2$, $(x,t) \in \overline{\Omega}$, $\xi \in \mathbb{R}^n$,

(iv') $\|a_{ij}\|_{W^{1,\infty}(\Omega)} + \|\partial_k a_{ik} + b_k\|_{L^\infty(\Omega)} + \|c\|_{L^\infty(\Omega)} \leq A$,

où $\lambda > 0$ et $A > 0$ sont deux constantes.
Soit $\mathfrak{a}$ la forme bilinéaire non bornée définie par $D(\mathfrak{a}) = H^1(\Omega)$ et

$$\mathfrak{a}(u,v) = \int_\Omega a_{ij}\partial_i u \partial_j v dx + \int_\Omega b_k \partial_k u v dx + \int_\Omega c u v dx, \quad u, v \in D(\mathfrak{a}).$$

Nous associons à $\mathfrak{a}$ l'opérateur non borné $\mathcal{A}$ donné par

$$D(\mathcal{A}) = \{u \in L^2(\Omega);\ \exists v \in L^2(\Omega) : \mathfrak{a}(u,\varphi) = (v,\varphi)_2,\ \varphi \in H^1(\Omega)\},\ \mathcal{A}u := v.$$

Alors, $-\mathcal{A}$ est le générateur d'un semi-groupe holomorphe $e^{-t\mathcal{A}}$.
Soit $Q = \Omega \times (0,T)$, $\Sigma = \partial\Omega \times (0,T)$, $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$ et $u \in C^{1,0}(\overline{Q}) \cap C^{2,1}(Q)$ ([28, Theorem2, page 144]) l'unique solution du PN

$$\begin{cases} \mathcal{L}u = 0 & \text{in } Q, \\ u(\cdot\,,0) = \psi & \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu u = 0 & \text{on } \Sigma. \end{cases} \tag{1.18}$$

Nous avons

$$u(t) = e^{-t\mathcal{A}}\psi(x) = \int_\Omega G(x,t;\xi,0)\psi(\xi)d\xi,\ 0 < t \leq T.$$

Nous pouvons réécrire cette égalité sous la forme :

$$e^{-t\mathcal{A}}\psi(x) = \int_\Omega K(x,\xi,t)\psi(\xi)d\xi,\ 0 < t \leq T.$$

La fonction

$$K(x,\xi,t) = G(x,t;\xi,0)$$

est usuellement appelée noyau de la chaleur du semi-groupe $e^{-t\mathcal{A}}$.

Une conséquence immédiate du théorème de minoration gaussienne de la fonction de Neumann Green est le corollaire suivant :

Corollary 1.3.2. *Quand Ω possède la condition de chaîne, le noyau de la chaleur K satisfait la minoration gaussienne :*

$$\mathscr{G}_C(x-\xi,t) \leq K(x,\xi,t),\ \ (x,\xi) \in \Omega^2,\ 0 < t \leq T. \tag{1.19}$$

Nous avons aussi adapté, dans [15], la méthode de perturbation présentée dans [14] au cas du noyau de la chaleur de l'opérateur de Laplace-Beltrami pour une condition au bord de Neumann sur un domaine Ω de $\mathcal{M}$, où $\mathcal{M} = (\mathcal{M}, g)$ est une variété Riemannienne compacte connexe sans bord de dimension n.

Nous supposons que Σ, le bord de Ω, est une sous-variété de $\mathcal{M}$ de dimension $n-1$.

Nous noterons dV la mesure Riemanienne sur $\mathcal{M}$ et dA la mesure de densité sur Σ.

Nous posons $v(x,r) = V(B(x,r)\cap\Omega)$, où $B(x,r)$ est la boule géodésique de centre $x \in \Omega$ et de rayon $r > 0$. Nous faisons également les hypothèses suivantes :

(VLB) (minoration du volume) Il existe deux constantes C et r_0 telles que

$$v(x,r) \geq Cr^n,\ \ x \in \Omega,\ 0 < r \leq r_0.$$

(DP) (propriété de doublement) Il existe deux constantes $r_1 > 0$ et $C > 0$ telles que

$$v(x,s) \leq C\left(\frac{s}{r}\right)^n v(x,r),$$

pour tous $0 < r \leq s \leq r_1$ et $x \in \Omega$.

(CC) (condition de chaîne) Il existe une constante $C > 0$ telle que pour tout $x, y \in \Omega$ et $k \in \mathbb{N}$, il existe une suite de points $(x_i)_{0\leq i\leq k}$ telle que $x_0 = x$, $x_k = y$ et

$$d(x_i,x_{i+1}) \leq C\frac{d(x,y)}{k},\ \ 0 \leq i \leq k-1.$$

Notons que dans le cas plat, (VLC) et (DP) sont vérifiées pour tout domaine Lipschitz et que (CC) est vérifiée pour les domaines convexes.

Soit d la distance Riemannienne et soit

$$\mathscr{E}(x,y,t) = (4\pi t)^{-n/2}e^{-d^2(x,y)/4t}.$$

En général $\mathscr{E}$ n'est pas un noyau de la chaleur sur $\mathcal{M}$. Mais la méthode des paramétrices de S. Minakshisundaram et Å. Pleijel montre que toute variété Riemanienne compacte possède un noyau de la chaleur "presque euclidien". (cf [4], [9]). En particulier, le noyau de la chaleur p de $\mathcal{M}$ vérifie

$$p(x, y, t) \sim \mathscr{E}(x, y, t),$$

localement uniformément sur (x, y) quand $t \downarrow 0$. Notons qu'il existe un résultat similaire pour les dérivées premières de p et $\mathcal{E}$.

Cependant, cette estimation n'est pas vraie en général pour des x et y distants l'un de l'autre. En effet, le contre-exemple dans [40, Example 3.1, page 23] montre que, si $\mathcal{M} = \mathbb{S}^2$, la sphère de dimension 2 munie de sa métrique usuelle, si x est le pôle nord et y est le pôle sud, alors

$$p(x, y, t) \sim ct^{-3/2} e^{-\frac{d^2(x,y)}{4t}},$$

pour une constante $c > 0$.

Par contre, d'après [24, Theorem 5.5.11 et Theorem 5.6.1, page 173], toute variété Riemanienne complète avec une courbure de Ricci non négative vérifie la majoration et la minoration gaussiennes suivantes :

$$\mathcal{E}(x, y, t) \leq p(x, y, t) \leq \frac{c}{V(B(x, \sqrt{t})}e^{-\kappa \frac{d^2(x,y)}{4t}},$$

pour des constantes $c > 0$ et $\kappa > 0$.

Soit $\Delta = \Delta_g$ l'opérateur de Laplace-Beltrami associé à la métrique g et soit ν le champ normal extérieur de Σ. En suivant le même procédé que dans [14], nous pouvons construire la fonction de Green q associée au problème de Neumann suivant

$$\begin{cases} (\partial_t - \Delta)u = 0 & \text{in } \Omega \times (0, +\infty), \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} = 0, & \text{on } \Sigma \times (0, +\infty), \end{cases} \tag{1.20}$$

comme perturbation du noyau de la chaleur p par un potentiel de simple couche.

Nous obtenons

$$q(x, y, t) = p(x, y, t) + \int_0^t \int_\Sigma p(x, z, s) r(z, y, t - s) dA(z) ds,$$

où

$$r(x, y, t) = -2\frac{\partial p}{\partial \nu_x}(x, y, t) - 2\sum_{j\geq 1}\int_0^t \int_\Sigma r^j(x, z, s)\frac{\partial p}{\partial \nu_x}(z, y, t - s) dA(z) ds$$
$$(x, t) \in \Sigma \times (0, +\infty),\ y \in \overline{\Omega},$$

avec

$$r^1(x,y,t) = -2\frac{\partial p}{\partial \nu_x}(x,y,t), \;\; (x,t) \in \Sigma \times (0,+\infty), \; y \in \overline{\Omega},$$
$$r^{j+1}(x,y,t) = -2\int_0^t \int_\Sigma r^1(x,z,t-s) r^j(z,y,s) dA(z) ds, \;\; j \geq 1,$$
$$(x,t) \in \Sigma \times (0,+\infty), \; y \in \overline{\Omega}.$$

Or, d'après [9], pour tout $\mu > 0$, il existe une constante C_0 telle que

$$\left| \frac{\partial p}{\partial \nu_x}(x,y,t) \right| \leq C_0 t^{-\mu} d^{-n+2\mu}(x,y), \tag{1.21}$$

pour tout $x \in \Sigma$, $y \in \overline{\Omega}$ et $t \in (0,T]$.
Soit $1/2 < \mu < n/2$. Nous tirons du résultat précédent

$$|r(x,y,t)| \leq C t^{-\mu} d^{-n+2\mu}(x,y),$$

pour tous $x \in \Sigma$, $y \in \overline{\Omega}$, $x \neq y$, $t \in (0,T]$.
Nous en déduisons

$$|q_0(x,y,t)| \leq C t^{-n/2+\alpha} \;\; x,y \in \Omega, \; t > 0, \tag{1.22}$$

où

$$q_0(x,y,t) = \int_0^t \int_\Sigma p(x,z,s) r(z,y,t-s) dA(z) ds, \;\; x,y \in \Omega, \; t > 0$$

et $0 < \alpha < 1/2$.
Or, d'après [9], il existe $\epsilon > 0$ et $\eta > 0$ tels que

$$p(x,y,t) \geq \mathscr{E}(x,y,t), \;\; 0 < t \leq \eta, \; x,y \in \mathcal{M}, \; d(x,y) \leq \epsilon. \tag{1.23}$$

D'où

$$p(x,y,t) \geq C t^{-n/2}, \;\; 0 < t \leq \inf(\eta, \epsilon^2), \; x,y \in \mathcal{M}, \; d(x,y) \leq \sqrt{t}. \tag{1.24}$$

Ceci permet d'obtenir qu'il existe $\delta > 0$ tel que

$$q(x,y,t) \geq C t^{-n/2}, \;\; \text{if} \;\; 0 < t \leq \delta, \;\; x,y \in \Omega, \;\; d(x,y) \leq \sqrt{t}. \tag{1.25}$$

En utilisant la propriété (VLB) et en appliquant la même méthode que dans [42, Theorem 7.29, page 248], nous obtenons le théorème suivant :

Theorem 1.3.3. *Soit $T > 0$ fixé. Supposons que Ω satisfait (VLB), (DP) et (CC). Alors*

$$q(x,y,t) \geq \frac{c}{v(x,\sqrt{t})} e^{-\frac{d^2(x,y)}{ct}}, \;\; x,y \in \Omega, \; 0 < t \leq T. \tag{1.26}$$

1.3.3 Majoration gaussienne du noyau de la chaleur d'un domaine d'une variété

Dans [17], nous avons cherché à obtenir une majoration gaussienne pour le noyau de la chaleur associé à l'opérateur de Laplace-Beltrami avec condition de Neumann au bord.

Nous avons considéré $(\mathcal{M}, g)$ une variété complète de dimension n sans bord et Ω un domaine de $\mathcal{M}$ ayant un bord Γ Lipschitzien.

Nous supposons que $\mathcal{M}$ vérifie la propriété de doublement du volume (notée (VD)) : il existe une constante $C > 0$ telle que

$$V(x, 2r) \leq CV(x, r), \;\; x \in \mathcal{M}, \; r > 0.$$

En outre, nous supposons que le noyau de la chaleur $p(t, x, y)$ de l'opérateur de Laplace-Beltrami sur $\mathcal{M}$ vérifie la majoration gaussienne

$$p(t, x, y) \leq \frac{C}{\left[V(x, \sqrt{t})V(y, \sqrt{t})\right]^{1/2}} e^{-c\frac{d^2(x,y)}{t}}, \;\; t > 0, \; x, y \in \mathcal{M}, \tag{1.27}$$

où C et c sont des constantes positives.

Notons que si la variété à une courbure de Ricci non négative, alors les deux précédentes propriétés sont vérifiées. En effet la propriété de doublement de volume est une conséquence du théorème de Gromov-Bishop. Et la majoration gaussienne a été démontrée dans [36].

Nous définissons V_Ω par

$$V_\Omega(x, r) = \mu\left(B(x, r) \cap \Omega\right), \;\; r > 0, \; x \in \Omega.$$

Nous supposons que Ω vérifie la variante suivante de la propriété de doublement de volume (VD) : il existe deux constantes $K > 0$ et $\delta > 0$ telles que

$$V_\Omega(x, s) \leq K \left(\frac{s}{r}\right)^\delta V_\Omega(x, r), \;\; 0 < r \leq s, \; x \in \Omega. \tag{1.28}$$

Notons que tous les domaines bornés Lipschitz de $\mathbb{R}^n$ vérifient cette propriété.

Notons enfin que si $\mathcal{M}$ a une courbure sectionnalle majorée et vérifie la condition de croissance du volume suivante

$$V(x, r) \leq c_1 r^n, \;\; 0 < r \leq r_1,$$

pour des constantes c_1 et r_1, et si de plus Ω a un diamètre fini et vérifie une condition de cône intérieur , alors Ω vérifie la condition (VD) souhaitée.

Soit h le noyau gaussien de l'opérateur de Laplace-Beltrami sur Ω avec condition de Neumann au bord. Nous avons obtenu dans [17] la majoration gaussienne suivante :

Theorem 1.3.4. *Si les conditions citées ci-dessus sur $\mathcal{M}$ et Ω sont vérifiées, et si diam$(\Omega) < \infty$, alors*

$$h(t, x, y) \leq \frac{C}{\left[V_\Omega(x, \sqrt{t})V_\Omega(y, \sqrt{t})\right]^{1/2}} e^{-\frac{d^2(x,y)}{8t}}, \;\; t > 0, \; x, y \in \Omega.$$

Ce théorème a plusieurs conséquences, sous les mêmes hypothèses sur $\mathcal{M}$ et Ω.

La première est que le semi-groupe $e^{-t\mathcal{A}}$ s'étend à un semi-groupe holomorphe de $\mathbb{C}^+$ dans $L^p(\Omega,\mu)$ pour tout $p \in [1,\infty)$, avec $\mathcal{A}$ l'opérateur définit par $\mathcal{A}u = -\Delta u$ et ayant pour domaine

$$D(\mathcal{A}) = \{u \in H_\Delta(\Omega);\ \partial_\nu u = 0\}.$$

La deuxième est que le spectre de $\mathcal{A}$, vu comme un opérateur agissant sur $L^p(\Omega)$, $p \in [1,\infty)$, est indépendant de p.

Pour démontrer le théorème de majoration gaussienne, nous utilisons tout d'abord le fait que Ω a la propriété d'1-extension (cf [39, Theorem C]) et que l'inégalité suivante de type Gagliardo-Nirenberg est vérifiée (cf [6, Theorem 1.2.1]) : il existe une constante $C > 0$ telle que

$$\|fV^{\frac{1}{2}-\frac{1}{q}}(\cdot,r)\|_q \leq C\left(\|f\|_2 + r\||\nabla f|\|_2^2\right),\quad r>0,\ f \in C_0^\infty(\mathcal{M}). \tag{1.29}$$

Ceci nous permet d'obtenir, pour toute fonction $f \in H^1(\Omega)$, l'inégalité suivante :

$$\|fV_\Omega(\cdot,r)^{\frac{1}{2}-\frac{1}{q}}\|_{q,\Omega} \leq C\left(\|f\|_{2,\Omega} + r\||\nabla f|\|_{2,\Omega}\right),\quad r>0,\ f \in H^1(\Omega). \tag{1.30}$$

Ensuite, en utilisant [6, Theorem 1.3], nous obtenons que h possède une majoration de la forme

$$h(t,x,y) \leq \frac{C}{\left[V_\Omega(x,\sqrt{t})V_\Omega(y,\sqrt{t})\right]^{1/2}},\quad t>0,\ x,y \in \Omega. \tag{1.31}$$

Enfin, en utilisant le fait que $e^{-t\mathcal{A}}$ satisfait la propriété de Davies-Gaffney, nous obtenons le résultat de majoration gaussienne de h souhaité grâce à [21, Corollary 5.4, page 524]. Rappelons que la propriété de Davies-Gaffney est la suivante : pour tous $t > 0$, U_1, U_2 ouverts inclus dans Ω, $f \in L^2(U_1, d\mu)$ et $g \in L^2(U_2, d\mu)$,

$$\left|(e^{-t\mathcal{A}}f,g)_{2,\Omega}\right| \leq e^{-\frac{r^2}{4t}}\|f\|_{2,\Omega}\|g\|_{2,\Omega}.$$

Ici

$$r = \mathrm{dist}(U_1,U_2) = \inf_{x\in U_1,\ y\in U_2} d(x,y).$$

1.4 Potentiels isospectraux

Dans cette thèse, nous avons également travaillé sur un problème de potentiels isospectraux [16].

Soit $\mathbf{a} = (a_{ij})_{1\leq i,j\leq n}$, une matrice symétrique avec coefficients $C^\infty(\mathbb{R}^n)$. Nous avons supposé que $\mathbf{a}$ est uniformément elliptique, c'est-à-dire qu'il existe une constante $\mu \geq 1$ telle que l'estimation

$$\mu^{-1} \leq \mathbf{a}(x) \leq \mu$$

est vérifiée pour tout $x \in \mathbb{R}^n$.

Soit $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ un domaine C^∞ de frontière bord $\partial\Omega$ et considérons l'opérateur auto-adjoint A, de domaine $D(A) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$, défini par

$$A = -\mathrm{div}(\mathbf{a}(x)\nabla\cdot) = -\sum_{i,j=1}^{n} \partial_j(a_{ij}(x)\partial_i\cdot).$$

Nous avons perturbé A par un potentiel $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ et avons noté $A_V = A + V$. Notons que d'après [43, Theorem X.12, page 162], $D(A_V) = D(A)$.

Nous avons défini

$$Z_\Omega^V(t) = \mathrm{tr}\left(e^{-tA_V} - e^{-tA}\right),\ t > 0.$$

Nous avons obtenu l'existence de coefficients réels $c_k(V)$, $k \geq 1$, dépendant seulement de V, tels que le développement asymptotique

$$Z_\Omega^V(t) = t^{-n/2}\left(tc_1(V) + t^2c_2(V) + \ldots + t^pc_p(V) + O\left(t^{p+1}\right)\right),\ t \downarrow 0$$

est vérifié pour $\mathbf{a}$ constant.

Nous avons également montré que les deux formules précédentes restent vraies quand Ω est remplacé par $\mathbb{R}^n$ et, par conséquent, $H_0^1(\Omega)$ par $H^1(\mathbb{R}^n)$. $Z_{\mathbb{R}^n}^V$ sera alors noté Z^V.

Notons que, comme Ω est borné, l'injection $H_0^1(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$ est compacte. Par conséquent, A_V a un spectre discret.

Nous avons noté $\{\lambda_j^V,\ j \in \mathbb{N}^*\}$ la suite des valeurs propres de A_V, répétées en fonction de leur multiplicité. Nous avons, de même, noté $\{\lambda_j,\ j \in \mathbb{N}^*\}$ la suite des valeurs propres de A, répétées en fonction de leur multiplicité.

Nous définissons l'ensemble isospectral associé au potentiel $V \in C_0^\infty(\Omega)$ de la façon suivante :

$$\mathrm{Is}(V) = \{W \in C_0^\infty(\Omega);\ \lambda_k^V = \lambda_k^W,\ k \in \mathbb{N}^*\}.$$

Nous avons obtenu le résultat principal suivant :

Theorem 1.4.1. *Soit* $\mathbf{a}$ *la matrice identité de* $\mathbb{R}^{n^2}$*. Alors, pour tout* $V \in C_0^\infty(\Omega)$ *et tout ensemble borné* $\mathcal{B} \subset L^\infty(\Omega)$*, l'ensemble Is*$(V) \cap \mathcal{B}$ *est borné dans* $H^2(\Omega)$*.*

Comme l'inclusion de $H^2(\Omega)$ dans $H^s(\Omega)$ est une inclusion compacte pour tout $s < 2$, nous avons déduit du théorème précédent le corollaire suivant :

Corollary 1.4.1. *Sous les conditions du théorème précédent, l'ensemble Is*$(V) \cap \mathcal{B}$ *est compact dans* $H^s(\Omega)$ *pour tout* $s \in (-\infty, 2)$*.*

1.4.1 Résultats antérieurs

Le célèbre problème de M. Kac ([34]) :"Peut-on entendre la forme d'un tambour ?", est directement lié au développement asymptotique de la trace du semi-groupe $(e^{t\Delta_g})$ sur une variété Riemanienne compacte (M, g) :

$$\mathrm{tr}\left(e^{t\Delta_g}\right) = t^{-n/2}\left(e_0 + te_1 + t^2e_2 + \ldots + t^ke_k + O\left(t^{k+1}\right)\right).$$

Ici Δ_g est l'opérateur de Laplace-Beltrami operator associé à la métrique g et les coefficients e_k, $k \geq 0$ sont des invariants Riemaniens qui dépendent du tenseur de courbure et de ses dérivées covariantes.

Notons que le point clé de la preuve du développement asymptotique de tr $\left(e^{t\Delta_g}\right)$ est la construction d'une parametrice pour l'équation de la chaleur $\partial_t - \Delta_g$, construction inititiée par S. Minakshisudaram and Å. Pleijel in [38].

Nous pouvons citer les références [4], [10], [29], [34], [37] qui traitent du développement asymptotique de tr $\left(e^{t\Delta_g}\right)$.

Le développement asymptotique de Z^V dans le cas du Laplacien sur l'espace tout entier a été obtenu par Y. Colin de Verdière dans [19] en adaptant la méthode permetant d'obtenir le développement asymptotique de tr $\left(e^{t\Delta_g}\right)$.

Une preuve alternative pour le développement asymptotique de Z^V, obtenue dans [3] par R. Bañuelos and A. Sá Barreto, consiste à utiliser la transformée de Fourier.

Notre approche est différente. En effet, pour obtenir le développement asymptotique de Z_Ω^V, on relie le noyau de la chaleur de e^{-tA_V} à celui de e^{-tA} en utilisant la formule de Duhamel. Les coefficients c_k, $k \geq 1$ obtenus sont exprimés comme des intégrales sur Ω de fonctions polynomiales en V et ses dérivées. Notons que la situation est similaire dans [3, Theorem 2.1, page 2154], où les mêmes coefficients sont exprimés sous la forme de produits tensoriels $\widehat{V} \otimes \ldots \otimes \widehat{V}$, où $\widehat{V}$ est la transformée de Fourier du potentiel V.

Signalons que la preuve du résultat principal de notre article sur la compacité des potentiels isospectraux se déduit du calcul des quatre premiers termes du développement asymptotique de Z_Ω^V. Cela vient de l'identité

$$\sum_{k\geq 1} e^{-\lambda_k^V t} = \operatorname{tr}\left(e^{-tA_V}\right) = \operatorname{tr}\left(e^{-tA}\right) + Z_\Omega^V(t),$$

qui relie les ensembles isospectraux de A_V avec la trace de la chaleur de A.

Notons que des résultats de compacité de potentiels isospectraux associés à l'opérateur $\Delta_g + V$ ont déjà été obtenus par Brüning (cf [7, Theorem 3, page 696]) dans le cas d'une variété Riemanienne compacte de dimension inférieure ou égale à 3. Ces résultats ont ensuite été améliorés par Donnelly dans [25].

1.4.2 Préliminaires

Soit K le noyau de la chaleur associé au semi-groupe e^{-tA} agissant sur $L^2(\Omega)$ et soit K^V le noyau de la chaleur associé au semi-groupe e^{-tA_V} agissant sur $L^2(\Omega)$.

En utilisant la formule de Duhamel, nous avons obtenu une formule reliant K et K^V :

$$K^V(t,x,y) = K(t,x,y) - \int_0^t \int_\Omega K(t-s,x,z)V(z)K^V(s,z,y)dzds,\ t>0,\ x,y\in\Omega.$$

En résolvant cette équation intégrale par approximations successives, nous obtenons

$$K^V(t,x,y) = \sum_{j\geq 0} K_j^V(t,x,y),\ t>0,\ x,y\in\Omega,$$

avec

$$K_0^V(t,x,y) = K(t,x,y)$$

et

$$K_j^V(t,x,y) = (-1)^j \int_{\Omega^n} \int_0^t \int_0^{t_1} \dots \int_0^{t_{j-1}} \left[\prod_{i=1}^{j} K(t_{i-1}-t_i, z_{i-1}, z_i) V(z_i) \right] K(t_j, z_j, y) dz^j dt^j,$$

où $t_0 = t$, $z_0 = x$, et $du^j = du_1 \dots du_j$ pour $u = z, t$.
Définissons :

$$A_j^V(t) = \int_\Omega K_j^V(t,x,x)dx, \ j \in \mathbb{N}.$$

Nous avons ainsi

$$\int_\Omega K^V(t,x,x)dx = \sum_{j\geq 0} A_j^V(t)$$

Or, comme e^{-tA_V} est un opérateur intégral de noyau régulier (cf [24]),

$$\operatorname{tr}\left(e^{-tA_V}\right) = \int_\Omega K^V(t,x,x)dx = \sum_{k\geq 1} e^{-t\lambda_k^V}, \ t > 0.$$

Donc

$$Z_\Omega^V(t) = \sum_{j\geq 1} A_j^V(t), \ t > 0.$$

Par ailleurs, considérons la solution fondamentale Γ de l'équation parabolique

$$\partial_t - \operatorname{div}(\mathbf{a}(x)\nabla \cdot) = \partial_t - \sum_{i,j=1}^{n} \partial_j (a_{ij}(x)\partial_i \ , \cdot) = 0 \text{ in } \mathbb{R}^n.$$

En étendant $V \in C_0^\infty(\Omega)$ sur $\mathbb{R}^n$ en posant $V(x) = 0$ pour tout $x \in \mathbb{R}^n \setminus \Omega$, nous posons

$$\Gamma_0^V(t,x,y) = \Gamma(t,x,y) \text{ et } \Gamma_{j+1}^V(t,x,y) = -\int_0^t \int_{\mathbb{R}^n} \Gamma(t-s,x,z)V(z)\Gamma_j^V(s,z,y)dsdz, j \in \mathbb{N},$$

pour tous $t > 0$ et $x, y \in \mathbb{R}^n$.
Cela nous permet de définir

$$B_j^V(t) = \int_\Omega \Gamma_j^V(t,x,x)dx, \ t > 0, \ j \in \mathbb{N}.$$

Notons par ailleurs qu'en utilisant le principe du maximum, nous avons les inégalités suivantes :

$$0 \leq K(t,x,y) \leq \Gamma(t,x,y), \ t > 0, \ x, y \in \Omega$$

et, pour tout $\delta > 0$

$$0 \leq \Gamma(t,x,y) - K(t,x,y) \leq (ct)^{-n/2} e^{-c\delta^2/t}, \ 0 < t \leq \frac{2c\delta^2}{n}, \ x \in \Omega, \ y \in \Omega_\delta,$$

où $\Omega_\delta = \{x \in \Omega;\ \mathrm{dist}(x, \partial\Omega) > \delta\}$.

En utilisant ces inégalités, nous obtenons la proposition suivante qui relie le comportement asymptotique de $A_j^V(t)$ à celui de $B_j^V(t)$ quand $t \downarrow 0$:

Proposition 1.4.1. *Soit $j \in \mathbb{N}^*$. Pour tout $k \in \mathbb{N}$ on a $A_j^V(t) = B_j^V(t) + O(t^k)$ quand $t \downarrow 0$.*

Dans ce cas où $\mathbf{a}$ est à coefficients constants, $\Gamma(t, x, y)$ est connu de façon explicite et coïncide avec le noyau gaussien suivant

$$G(t, x - y) = (4\pi t)^{-n/2} \left(\det \mathbf{a}^{-1}\right)^{-1/2} e^{-\mathbf{a}^{-1}(x-y)\cdot(x-y)/(4t)},\ t > 0,\ x, y \in \mathbb{R}^n,$$

où $\mathbf{a}^{-1}$ est la matrice inverse de $\mathbf{a}$.

Lemma 1.4.1. *Supposons que $\mathbf{a}$ est à coefficients constants et posons $j \in \mathbb{N}^*$. Alors*

$$\begin{aligned}\Gamma_j^V(t, x, x) \quad = \quad & (-1)^j t^{j-n/2} \int_{(\mathbb{R}^n)^j} \int_0^1 \int_0^{s_1} \dots \int_0^{s_{j-1}} \left[\prod_{i=1}^j G(s_{i-1} - s_i, w_{i-1} - w_i) V(x + \sqrt{t} w_i)\right] \\ & \times G(s_j, w_j) ds^j dw^j,\end{aligned}$$

pour tous $t > 0$ et $x \in \mathbb{R}^n$. Ici, on a posé $s_0 = 1$, $w_0 = 0$ et $du^j = du_1 \dots du_j$ pour $u = s, w$.

1.4.3 Développements asymptotiques

Nous nous plaçons toujours dans le cas où $\mathbf{a}$ est à coefficients constants.

Grâce à l'expression de $\Gamma_j^V(t, x, x)$ obtenue dans le lemme précédent, et en utilisant la formule de Taylor, nous tirons

$$t^{n/2} \sum_{j \geq 1} B_j^V(t) = \sum_{\ell=1}^p t^\ell \mathcal{P}_{2\ell}(V) + O(t^{p+1}),$$

où

$$\mathcal{P}_\ell(V) = \sum_{1 \leq j \leq \ell/2} (-1)^j \sum_{|\alpha^j| = \ell - 2j} c_{\alpha^j} P_{\alpha^j}(V),$$

avec

$$P_{\alpha^j}(V) = \int_\Omega \prod_{k=1}^j \partial^{\alpha_k^j} V(x) dx,\ j \in \mathbb{N}^*$$

et

$$c_{\alpha^j} = \frac{1}{\alpha^j!} \int_{(\mathbb{R}^n)^j} \int_0^1 \int_0^{s_1} \dots \int_0^{s_{j-1}} W_j^{\alpha_j} \left[\prod_{i=1}^j G(s_{i-1} - s_i, w_{i-1} - w_i)\right] G(s_j, w_j) ds^j dw^j,$$

où $s_0 = 1$, $w_0 = 0$, et $du^j = du_1 \dots du_j$ pour $u = s, w$ et $W_j^{\alpha_j}$ est un certain polynôme de $w_1 \dots w_j$.

En utilisant le fait que, $A_j^V(t) = B_j^V(t) + O(t^k)$ quand $t \downarrow 0$, pour tout $k \in \mathbb{N}$ (j étant fixé dans $\mathbb{N}^*$), nous obtenons le résultat suivant :

Proposition 1.4.2. *Pour tout $p \in \mathbb{N}^*$, le développement asymptotique de $Z_\Omega^V(t)$ quand $t \downarrow 0$ a pour expression*

$$\sum_{\ell=1}^{p} t^\ell \mathcal{P}_{2\ell}(V) + O(t^{p+1}).$$

Comme $Z_\Omega^V(t) = \sum_{k\geq 1} e^{-t\lambda_k^V} - \sum_{k\geq 1} e^{-t\lambda_k}$, ce résultat a pour corollaire immédiat :

Corollary 1.4.2. *Soit $V_0 \in C_0^\infty(\Omega)$. Tout $V \in Is(V_0)$ vérifie*

$$\mathcal{P}_\ell(V) = \mathcal{P}_\ell(V_0),\ \ell \geq 2.$$

Par ailleurs, considérons

$$Z^V(t) = \mathrm{tr}(e^{-tH_V} - e^{-tH}),\ t > 0$$

au lieu de $Z_\Omega^V(t)$, où H est l'opérateur auto-adjoint engendré sur $L^2(\mathbb{R}^n)$ par la forme quadratique fermée

$$\mathfrak{h}[u] = \int_{\mathbb{R}^n} \mathbf{a}(x)\nabla u(x) \cdot \nabla u(x) dx,\ u \in D(\mathfrak{h}) = H^1(\mathbb{R}^n).$$

Nous avons alors

$$Z^V(t) = \sum_{j\geq 1} H_j^V(t),\ t > 0,\ \text{où}\ H_j^V(t) = \int_{\mathbb{R}^n} \Gamma_j^V(t, x, x) dx,\ j \in \mathbb{N}.$$

En utilisant l'expression obtenue :

$$t^{n/2} \sum_{j\geq 1} B_j^V(t) = \sum_{\ell=1}^{p} t^\ell \mathcal{P}_{2\ell}(V) + O(t^{p+1}),$$

et en remarquant que, comme le support de V est inclut dans Ω, on a $P_{\alpha^j}(V) = \int_{\mathbb{R}^n} \prod_{k=1}^{j} \partial^{\alpha_k^j} V(x) dx$ pour tout $j \in \mathbb{N}^*$, nous en déduisons que :

$$t^{n/2} \sum_{j\geq 1} H_j^V(t) = \sum_{\ell=1}^{p} t^\ell \mathcal{P}_{2\ell}(V) + O(t^{p+1}).$$

Nous obtenons ainsi le résultat suivant :

Proposition 1.4.3. *Pour tout $p \in \mathbb{N}^*$, le développement asymptotique de $Z^V(t)$ quand $t \downarrow 0$ a pour expression*

$$\sum_{\ell=1}^{p} t^\ell \mathcal{P}_{2\ell}(V) + O(t^{p+1}).$$

Notons que ce développement asymptotique de Z^V reste vrai si $V \in \mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$.

1.4.4 Compacité des potentiels isospectraux

Ici $\mathbf{a} = \mathbf{I}$.
Des calculs longs mais explicites donnent

$$\mathcal{P}_{2k+1} = 0, \ \forall k \in \mathbb{N},$$

$$\mathcal{P}_2(V) = -(4\pi)^{-n/2} \int_\Omega V dx,$$

$$\mathcal{P}_4(V) = \frac{(4\pi)^{-n/2}}{2} \int_\Omega V(x)^2 dx,$$

$$\mathcal{P}_6(V) = -\frac{(4\pi)^{-n/2}}{6} \left(\frac{1}{2} \int_\Omega |\nabla V(x)|^2 dx + \int_\Omega V(x)^2 dx \right).$$

Nous avons également

$$\sum_{|\gamma|=2} \int_\Omega |\partial^\gamma V(x)|^2 dx + \int_\Omega V(x)^4 dx \leq C'_n \left(|\mathcal{P}_8(V)| + \|V\|_\infty \int_\Omega |\nabla V(x)|^2 dx. \right)$$

pour une constante $C'_n > 0$ qui ne dépend que de n.
En utilisant l'expression explicite de $\mathcal{P}_6(V)$ et l'estimation précédente sur $\mathcal{P}_8(V)$, et en utilisant le fait que, pour tout $V \in Is(V_0)$, on a $\mathcal{P}_l(V) = \mathcal{P}_l(V_0)$, $\forall l \geq 2$, nous obtenons que l'ensemble $\mathrm{Is}(V_0) \cap \mathcal{B}$ est borné dans $H^2(\Omega)$.

Bibliographie

[1] D. G. Aronson, *Bounds for the fundamental solution of a parabolic equation*, Bulletin of American Math. Soc. 73 (1967), 890-896.

[2] D. G. Aronson, *Non-negative solutions of linear parabolic equations*, Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa 22 (3) (1968), 607-694.

[3] R. Bañuelos and A. Sá Barreto, *On the heat trace of Schrödinger operators*, Commu. Part. Diff. Equat. 20 (11, 12) (1995), 2153-2164.

[4] M. Berger P. Gauduchon and E. Mazet, *Le spectre d'une variété Riemannienne*, Lect. Motes. Math. 194, Springer, Berlin, 1974.

[5] P. Besala, *On a certain property of the fundamental solution of a linear parabolic equation the last coeeficient of which is unbounded*, Bull. Acad. Polon. Sci. Sér. Sci. MAth. Astronom. Phys. 11 (1963), 155-158.

[6] S. Boutayeb, T. Coulhon and A. Sikora, *A new approach to pointwise heat kernel upper bounds on doubling metric mesure spaces*, Advances in Math. 270 (2015) 302-374.

[7] J. Brüning, *On the compactness of isospectral potentials*, Commun. Part. Differ. Equat. 9 (7) (1984), 687-698.

[8] K. Burdzy, Z.-Q. Chen and J. Sylvester, *The heat equation and reflected Brownian motion in time-dependent domains*, Ann. Probab. 32 (2004), 775-804.

[9] I. Chavel, *Eigenvalues in Riemannian geometry*, Academic Press, Orlando, 1984.

[10] I. Chavel, *Heat diffusion in insulated convex domains*, J. London Math. Soc., 34 (3) (1986) 473-478.

[11] S. Cho, *Two-sided global estimates of Green's function of parabolic equations*, Potential Anal. 25 (2006), 387-398.

[12] S. Cho, S. Kim and H. Park, *Two-sided estimates on Dirichlet heat kernels for time-dependent parabolic operators with singular drifts*, J. Diffent. Equat. 252 (2012), 1101-1145.

[13] J. Choi and S. Kim , *Green's function for second order parabolic systems with Neumann boundary condition*, J. Diffent. Equat. 252 (2013), 2834-2860.

[14] M. Choulli and L. Kayser, *Gaussian lower bound for the Neumann Green function of a general parabolic operator*, Positivity 19 (3) (2015) 625-646.

[15] M. Choulli and L. Kayser, *A remark on the Gaussian lower bound for the Neumann heat kernel of the Laplace-Beltrami operator*, Semigroup Forum (2015)

[16] M. Choulli, L. Kayser, Y. Kian and E. Soccorsi, *Heat trace asymptotics and boundedness in the second order Sobolev space of isospectral potentials for the Dirichlet laplacian*, Asymptot. Anal. 92 (2015) 259-278.

[17] M. Choulli, L. Kayser and E. M. Ouhabaz, *Observations on Gaussian upper bounds for the Neumann heat kernel*, Bull. Aust. Math. Soc. 92 (2015) 429-439.

[18] M. Choulli, E. M. Ouhabaz and M. Yamamoto, *Stable determination of a semilinear term in a parabolic equation* Commun. Pure Appl. Anal. 5 (3) (2006) 447-462.

[19] Y. Colin De Verdière, *Une formule de trace pour l'opérateur de Schrödinger dans* $\mathbb{R}^3$, Ann. Scient. ENS, série 4, 14 (1) (1981), 27-39.

[20] Th Coulhon, *Off-diagonal heat kernel lower bound without Poincaré*, J. London Math. Soc., (2) 68 (3) (2003) 795-819.

[21] T. Coulhon and A. Sikora, *Gaussian heat kernel bounds via Phragmèn-Lindelöf theorem*, Proc. London Math. Soc. 3, **96** (3) (2008) 507-544.

[22] D. Daners, *Heat kernel estimates for operators with boundary conditions*, Math. Nachr. 217 (2000), 13-41.

[23] E. B. Davies, *Gaussian upper bounds for the heat kernels of some second order operators on Riemanian manifolds*, J. Funct. Anal. 1988.

[24] E. B. Davies, *Heat kernels and spectral theory*, Cambridge Tracts in Math. 92, Cambridge University Press, London 1989.

[25] H. Donnelly, *Compactness of isospectral potentials*, Trans. American Math. Soc. 357 (5) (2004), 1717-1730.

[26] S. D. Eidel'man and F. O. Porper, *Two-sided estimates for fundamental solutions of second-order parabolic equations, and some applications,* Uspekhi. Mat. Nauk 39 (3) (1984), 107-156 ; Russian Math. Surveys 39 (3) (1984), 119-178.

[27] E. Fabes and D. W. Stroock, *A new proof of Moser's parabolic Harnack inequality using the old ideas of Nash*, Arch. Rat. Mech. Anal. 96 (1986), 327-338.

[28] A. Friedman, *Partial differential equations of parabolic type*, Englewood Cliffs NJ, Prentice-Hall, 1964.

[29] P. B. Gilkey, *Asymptotic formulae in spectral geometry*, Chapman and Hall/CRC, Boca Raton, 2004.

[30] A. Grigor'yan, *Heat kernel upper bounds on a complete non-compact manifold*, Rev. Mat. Iberoamericana, 10, 395-452, 1994.

[31] A. Grigor'yan, *Gaussian upper bounds for the heat kernel on arbitrary manifolds*, J. Diff. Geom., 45, 1, 33-52, 1997.

[32] W. Hebisch and L. Saloff-Coste, *On the relation between elliptic and parabolic Harnack inequalities*, Ann. Inst. Fourier, 51, 1437-1481, 2001.

[33] A. M. Il'in, A. S. Kalashnikov and O. A. Oleinik, *Second order linear equations of parabolic type type*, Russian Math. Surveys 17 No. 3 (1962), 1-143.

[34] M. Kac, *Can one hear the shape of a drum ?*, Amer. Math. Monthly 73 (1964), 1-23.

[35] E. E. Levi, *Sulle equazioni lineari totalmente alle derivate parziali,* Rend. Circ. Mat. Palermo, 24 (1907), 275-317.

[36] P. Li and S.T. Yau, *On the parabolic kernel of the Schrödinger operator*, Acta Math. 156 (1986), 153-201

[37] H. P. McKean Jr. and I. M. Singer, *Curvature and the eigenvalues of the laplacian*, J. Diff. Geometry 1 (1967), 43-69.

[38] S. Minakshisudaram and Å. Pleijel, *Some properties of the eigenfunctions of the Laplace-operator on riemannian manifolds*, Can. J. Math 1 (1949), 242-256.

[39] D. Mitrea, M. Mitrea and M. C. Shaw, *Traces of differential forms on Lipschitz domains, the boundary De Rham complex, and Hodge decompositions*, preprint.

[40] S. A. Molchanov, *Diffusion processes and Riemannian geometry,* Surveys 30 (1) (1975), 1-63.

[41] J. Nash, *Continuity of solutions of parabolic and elliptic equations*, American J. Math. 80 (1958), 931-954.

[42] E. M. Ouhabaz, *Analysis of heat equations on domains*, London Math. Soc. Monographs, vol. 31, Princeton University Press 2004.

[43] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics IV : Analysis of Operators*, Academic Press, 1978.

[44] L. Saloff-Coste, *A note on Poincaré, Sobolev and Harnack inequalities*, Duke Math. J., 65, I.M.R.N., 27-38, 1992.

[45] L. Saloff-Coste, *Unifomly elliptic operators on Riemannian manifolds*, J. Diff, Gem., 36, 417-450, 1992.

[46] D. W. Stroock, *Partial differential equations for probabilists*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, 112. Cambridge University Press, Cambridge, 2008.

[47] M. van den Berg, *Gaussian bounds for the Dirichlet heat kernel*, J. Funct. Anal. 88 (1990), 267-278.

[48] M. van den Berg, *A Gaussian lower bound for the Dirichlet heat kernel*, Bull. London Math. Soc. 24 (1992), 475-477.

Chapitre 2

Gaussian lower bound for the Neumann Green function of a general parabolic operator

Published in *Positivity* 19 (3) (2015) 625-646

GAUSSIAN LOWER BOUND FOR THE NEUMANN GREEN FUNCTION OF A GENERAL PARABOLIC OPERATOR

MOURAD CHOULLI AND LAURENT KAYSER

Abstract. Based on the fact that the Neumann Green function can be constructed as a perturbation of the fundamental solution by a single-layer potential, we establish a Gaussian lower bound for the Neumann Green function for a general parabolic operator. We build our analysis on classical tools coming from the construction of a fundamental solution of a general parabolic operator by means of the so-called parametrix method. At the same time we provide a simple proof for Gaussian two-sided bounds for the fundamental solution.

Key words : Parabolic operator, fundamental solution, parametrix, Neumann Green function, Gaussian lower bound, heat kernel.

Mathematics subject classification 2010 : 65M80

Contents

1. Introduction

Let Ω be a bounded domain of $\mathbb{R}^n$ with $C^{1,1}$-smooth boundary. Let $t_0 < t_1$, we set $Q = \Omega \times (t_0, t_1)$ and we consider the second order differential operator

$$L = a_{ij}(x,t)\partial_{ij}^2 + b_k(x,t)\partial_k + c(x,t) - \partial_t.$$

Here and henceforth we use the usual Einstein summation convention for repeated indices.

We make the following assumptions on the coefficients of L:

(i) the matrix $(a_{ij}(x,t))$ is symmetric for any $(x,t) \in \overline{Q}$,

(ii) $a_{ij} \in W^{1,\infty}(Q)$, $b_k,\ c \in C([t_0,t_1], C^1(\overline{\Omega}))$,

(iii) $a_{ij}(x)\xi_i\xi_j \geq \lambda|\xi|^2$, $(x,t) \in \overline{Q}$, $\xi \in \mathbb{R}^n$,

(iv) $\|a_{ij}\|_{W^{1,\infty}(Q)} + \|b_k\|_{L^\infty(Q)} + \|c\|_{L^\infty(Q)} \leq A$,

where $\lambda > 0$ and $A > 0$ are two given constants.

These assumptions are surely not the best possible if one wants to construct a fundamental solution or a Green function. But they are sufficient to carry out our analysis.

Since we will use the fundamental solution in the whole space, we begin by extending the coefficients of L in a neighborhood $\widetilde{\Omega}$ of $\overline{\Omega}$ to coefficients having the same regularity. We observe that this is possible in view of the regularity of Ω. For sake of simplicity, we keep the same symbols for the extended coefficients.

We may also assume that the ellipticity condition holds for the extended coefficients with the same constant λ. Pick $\psi \in C_0^\infty(\widetilde{\Omega})$ satisfying $0 \le \psi \le 1$ and $\psi = 1$ in a neighborhood of $\overline{\Omega}$. We set

$$\widetilde{a}_{ij} = a_{ij}\psi + \lambda\delta_{ij}(1-\psi),\;\; \widetilde{b}_k = b_k\psi,\;\; \widetilde{c} = c\psi$$

and

$$\widetilde{L} = \widetilde{a}_{ij}(x,t)\partial_{ij}^2 + \widetilde{b}_k(x,t)\partial_k + \widetilde{c}(x,t) - \partial_t.$$

Clearly, the coefficients of $\widetilde{L}$ satisfy the same assumptions as those of L. So in the sequel we will use the same symbol L for L or its extension $\widetilde{L}$.

We recall that the function

$$\mathscr{G}(x,t) = (4\pi t)^{-n/2}e^{-\frac{|x|^2}{4t}},\;\; x \in \mathbb{R}^n,\; t > 0,$$

is usually called the Gaussian Kernel. We set

$$\mathscr{G}_c(x,t) = c^{-1}\mathscr{G}(\sqrt{c}x,t),\;\; c > 0.$$

It is important to observe that the map $c \to \mathscr{G}_c$ is non increasing.

We are interested in establishing a Gaussian lower bound for the Neumann Green function associated to the operator L. More specifically, denoting by G the Neumann Green function for L, we want to prove an estimate of the form

$$\mathscr{G}_C(x-\xi,t-\tau) \le G(x,t;\xi,\tau),\;\; (x,t;\xi,\tau) \in Q^2,\, t > \tau,$$

where the constant C depends only on Ω, λ, $T = t_1 - t_0$ and A.

We succeed in proving that the above Gaussian lower bound holds true provided that Ω satisfies the chain condition. That is, there exists a constant $c > 0$ such that for any two points x, $y \in \Omega$ and for any positive integer m there exists a sequence $(x_i)_{0\le i\le m}$ of points in Ω such that $x_0 = x$, $x_m = y$ and

$$|x_{i+1} - x_i| \le \frac{c}{m}|x-y|,\;\; i = 0,\dots,m-1.$$

The sequence $(x_i)_{0\le i\le m}$ is referred to as a chain connecting x and y.

We see that any convex subset of $\mathbb{R}^n$ satisfies the chain condition with $c = 1$. In two dimensional case, the spherical shell $\mathcal{C} = B(0,2) \setminus \overline{B(0,1)}$ has the chain property with $c = \sqrt{2}$. This follows from the fact that any two points of $\mathcal{C}$ can be connected by a broken line consisting of two segments parallel to axes of coordinates.

We point out that a $C^{1,1}$-smooth domain does not possess necessarily the chain condition.

To our knowledge a Gaussian lower bound has never been established before for the Neumann Green function of a general parabolic operator. Moreover, even in the case of parabolic operators with time-independent coefficients, we can quote only three references: [5] when the domain is convex, [10] for smooth domains and [22] for a compact Riemannian manifold with boundary whose Ricci curvature is bounded from above and its boundary is convex.

A Gaussian upper bound for a general parabolic operator in divergence form was proved by Daners [11]. In [8], Choi and Kim obtained a Gaussian upper bound for a system of operators in divergence form under the assumption that the corresponding Neumann boundary value problem possesses a De Giorgi-Nash-Moser type estimate at the boundary. In [4], the authors established a gaussian upper bound for a Neumann Green function corresponding to a time-dependent domain.

The problem is quite different for a Dirichlet Green function since the latter vanishes on the boundary. One can prove in an obvious manner, with the help of the parabolic maximum principle, that a Dirichlet Green function is non negative and dominated pointwise by a fundamental solution and so it has a Gaussian upper bound. Aronson [2, Theorem 8, page 670] established an interior Gaussian lower bound for a Dirichlet Green function. It is worthwhile to mention that [2, Theorem 8, page 670] can be used to extend the results of [15, Section 3] to a general parabolic operator. In other words, one can obtain a proof of a continuity theorem by Nash [25] and Moser-Harnack inequality [24] for a general divergence form parabolic operator, since they rely on two-sided Gaussian bounds for the fundamental solution. Later, Cho [6], Cho, Kim and Park [7] extended this result to a global weighted Gaussian lower bound involving the distance to the boundary. A

Gaussian lower bound for a Dirichlet Green function when the Euclidian distance is changed by a geodesic distance was proved by van den Berg [31, 32].

For parabolic operators with time-independent coefficients, a fundamental solution or a Green function is reduced to a heat kernel. We mention that there is a tremendous literature dealing with Gaussian bounds for heat kernels. We quote the classical books by Davies [12], Grigor'yan [17], Ouhabaz [27] Saloff-Coste [29] and Stroock [30], but of course there are many other references on the subject.

As we said in the summary, the main ingredient in our analysis relies on the classical construction of the fundamental solution by means of the so-called parametrix method. We revisit this construction in the next section and we derive from it Gaussian two-sided bounds for the fundamental solution. In Section 3, we prove a Gaussian lower bound for the Neumann Green function. To do so, we construct the Neumann Green function as a perturbation of the fundamental solution by a single-layer potential. The Gaussian lower bound is then derived from the smoothing effect of the single-layer potential.

2. The parametrix method revisited

We are concerned in this section with Gaussian two-sided bounds for the fundamental solution of $Lu = 0$. For a systematic study of fundamental solutions, we refer to the classical monographs by A. Friedman [16] and O. A. Ladyzhenskaja, V. A. Solonnikov and N. N. Ural'tzeva [20].

In the sequel $P = \mathbb{R}^n \times (t_0, t_1)$.

We recall that a fundamental solution of $Lu = 0$ in P is a function $E(x, t; \xi, \tau)$ which is $C^{2,1}$ in $P^2 \cap \{t > \tau\}$, which satisfies

$$LE(\cdot\,, \cdot; \xi, \tau) = 0 \text{ in } \mathbb{R}^n \times \{\tau < t \le t_1\}, \text{ for any } (\xi, \tau) \in \mathbb{R}^n \times [t_0, t_1[$$

and, for any $f \in C_0(\mathbb{R}^n)$,

$$\lim_{t \searrow \tau} \int_{\mathbb{R}^n} E(x, t; \xi, \tau) f(\xi) d\xi = f(x), \quad x \in \mathbb{R}^n.$$

In this definition, we can also take a larger class of functions f. Namely, a class of continuous functions satisfying a certain growth condition at infinity (see for instance [16, formulas (6.1) and (6.2), page 22]).

The construction of a fundamental solution by means of the so-called parametrix method was initiated by E. E. Levi [21]. Let $a = (a^{ij})$ be the inverse matrix of (a_{ij}), $|a|$ the determinant of a and

$$Z(x, t; \xi, \tau) = [4\pi(t - \tau)]^{-n/2} \sqrt{|a(\xi, \tau)|} e^{-\frac{a(\xi,\tau)(x-\xi)\cdot(x-\xi)}{4(t-\tau)}}, \quad (x, t; \xi, \tau) \in P^2 \cap \{t > \tau\}.$$

This function is called the parametrix. It satisfies

$$L_0 Z(\cdot\,, \cdot\,, \xi, \tau) = 0 \text{ in } \mathbb{R}^n \times \{\tau < t \le t_1\} \text{ for any } (\xi, \tau) \in \mathbb{R}^n \times [t_0, t_1[, \tag{2.1}$$

where

$$L_0 = a_{ij}(\xi, \tau)\partial^2_{ij} - \partial_t.$$

When (ξ, τ) are fixed, L_0 is considered as a constant coefficients operator with respect to (x, t).

In the parametrix method we seek E, a fundamental solution of $Lu = 0$ in P, of the form

$$E(x, t; \xi, \tau) = Z(x, t; \xi, \tau) + \int_\tau^t \int_{\mathbb{R}^n} Z(x, t; \eta, \sigma)\Phi(\eta, \sigma; \xi, \tau) d\eta d\sigma, \tag{2.2}$$

where Φ is to be determined in order to satisfy $LE(\cdot\,, \cdot; \xi, \tau) = 0$ for any $(\xi, \tau) \in \mathbb{R}^n \times [t_0, t_1[$.

Following [16, Formulas (4.4) and (4.5), page 14], Φ is given by the series

$$\Phi = \sum_{\ell=1}^{\infty} \Phi_\ell,$$

where $\Phi_1(x, t; \xi, \tau) = LZ(x, t; \xi, \tau)$ and

$$\Phi_{\ell+1}(x, t; \xi, \tau) = \int_\tau^t \int_{\mathbb{R}^n} \Phi_1(x, t; \eta, \sigma)\Phi_\ell(\eta, \sigma; \xi, \tau) d\eta d\sigma, \quad \ell \ge 1.$$

Here, for simplicity, we write $LZ(x, t; \xi, \tau)$ instead of $[LZ(\cdot\,, \cdot; \xi, \tau)](x, t)$.

Let d_i, $1 \le i \le n$, given by

$$d_i = d_i(x,t;\xi,\tau) = -\frac{a^{ij}(\xi,\tau)(x_j-\xi_j)}{2(t-\tau)}, \quad (x,t;\xi,\tau) \in P^2 \cap \{t > \tau\}.$$

Then

$$\partial_i Z = d_i Z, \quad \partial_{ij}^2 Z = \left[-\frac{a^{ij}(\xi,\tau)}{2(t-\tau)} + d_j d_i\right] Z.$$

Therefore, taking into account (2.1), we get

$$LZ = LZ - L_0 Z = \left\{(a_{ij}(x,t) - a_{ij}(\xi,\tau))\left[-\frac{a^{ij}(\xi,\tau)}{2(t-\tau)} + d_j d_i\right] + b_k d_k + c\right\} Z.$$

We write $LZ = \Psi Z$, where

$$\Psi = (a_{ij}(x,t) - a_{ij}(\xi,\tau))\left[-\frac{a^{ij}(\xi,\tau)}{2(t-\tau)} + d_j d_i\right] + b_k d_k + c.$$

Let

$$M = \max_{i,j} \|a_{ij}\|_{W^{1,\infty}(Q)}, \quad N = \max(\max_k \|b_k\|_{L^\infty(Q)}, \|c\|_{L^\infty(Q)}, 1).$$

Since

$$\begin{aligned} &|d_i| \le \frac{|x-\xi|}{2\lambda(t-\tau)}, \\ &|a_{ij}(x,t) - a_{ij}(\xi,\tau)| \le M(|x-\xi| + t - \tau), \end{aligned}$$

we have

$$|\Psi(x,t;\xi,\tau)| \le N \frac{1}{\sqrt{t-\tau}} \mathscr{P}\left(\frac{|x-\xi|}{\sqrt{t-\tau}}\right). \tag{2.3}$$

Here $\mathscr{P}$ is a polynomial function of degree less than three whose coefficients depend only on M.

Unless otherwise stated, all the constants we use now do not depend on N.

In light of (2.3) we obtain

$$|LZ| \le CN(t-\tau)^{-(n+1)/2} P(\rho) e^{-(\lambda/4)\rho^2} = CN(t-\tau)^{-(n+1)/2}\left[P(\eta)e^{-(\lambda/8)\rho^2}\right] e^{-(\lambda/8)\rho^2},$$

with

$$\rho = \frac{|x-\xi|}{\sqrt{t-\tau}}.$$

But the function $\rho \in (0,+\infty) \longrightarrow P(\rho)e^{-(\lambda/8)\rho^2}$ is bounded. Consequently,

$$|\Phi_1(x,t;\xi,\tau)| = |LZ(x,t;\xi,\tau)| \le N\widetilde{C}(t-\tau)^{-(n+1)/2} e^{-\frac{\lambda^*|x-\xi|^2}{t-\tau}}, \tag{2.4}$$

where $\lambda^* = \lambda/8$.

The following lemma will be useful in the sequel. Its proof is given in [16, page 15].

Lemma 2.1. *Let $c > 0$ and $-\infty < \gamma, \beta < n/2+1$. Then*

$$\begin{aligned} &\int_\tau^t \int_{\mathbb{R}^n} (t-\sigma)^{-\gamma} e^{-\frac{c|x-\eta|^2}{t-\sigma}} (\sigma-\tau)^{-\beta} e^{-\frac{c|\eta-\xi|^2}{\sigma-\tau}} d\eta d\sigma \\ &\qquad = \left(\frac{4\pi}{c}\right)^{n/2} B(n/2-\gamma+1, n/2-\beta+1)(t-\tau)^{n/2+1-\gamma-\beta} e^{-\frac{c|x-\xi|^2}{t-\tau}}, \end{aligned}$$

where B is the usual beta function.

We want to show

$$|\Phi_\ell(x,t;\xi,\tau)| \le (N\widetilde{C})^\ell \widehat{C}^{\ell-1}(t-\tau)^{-(n+2-\ell)/2}\prod_{j=1}^{\ell-1}B(1/2,j/2)e^{-\frac{\lambda^*|x-\xi|^2}{t-\tau}},\quad \ell\ge 2. \tag{2.5}$$

Here $\widetilde{C}$ is the same constant as in (2.4) and $\widehat{C}=\left(\frac{4\pi}{\lambda^*}\right)^{n/2}$.

As

$$\Phi_2(x,t;\xi,\tau)=\int_\tau^t\int_{\mathbb{R}^n}\Phi_1(x,t;\eta,\sigma)\Phi_1(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma,$$

estimate (2.4) and Lemma 2.1 with $\gamma=\beta=n/2+1$ show that (2.5) holds true with $\ell=2$. The general case follows by an induction argument in ℓ. Indeed, using

$$\Phi_{\ell+1}(x,t;\xi,\tau)=\int_\tau^t\int_{\mathbb{R}^n}\Phi_1(x,t;\eta,\sigma)\Phi_\ell(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma,$$

(2.4), (2.5) for ℓ and Lemma 2.1 with $\gamma=n/2+1$ and $\beta=(n+2-\ell)/2$, we obtain easily that (2.5) holds true with $\ell+1$ in place of ℓ.

If Γ is the usual gamma function, we recall that

$$B(1/2,j/2)=\frac{\Gamma(1/2)\Gamma(j/2)}{\Gamma((j+1)/2)}.$$

Therefore

$$\prod_{j=1}^{\ell-1}B(1/2,j/2)=\frac{\Gamma(1/2)^\ell}{\Gamma(\ell/2)}=\frac{\sqrt{\pi}^\ell}{\Gamma(\ell/2)}. \tag{2.6}$$

Hence, (2.4)-(2.6) entail

$$|\Phi(x,t;\xi,\tau)|\le\sum_{\ell\ge1}|\Phi_\ell(x,t;\xi,\tau)|\le N\widetilde{C}(1+S)(t-\tau)^{-(n+1)/2}e^{-\frac{\lambda^*|x-\xi|^2}{t-\tau}}, \tag{2.7}$$

with

$$S=\sum_{\ell\ge1}\left[CN(t-\tau)^{1/2}\right]^\ell/\Gamma((\ell+1)/2).$$

We have $\Gamma((\ell+1)/2)=\Gamma(m+1/2)\ge\Gamma(m)=(m-1)!$ if $\ell=2m$ and $\Gamma((\ell+1)/2)=\Gamma(m+1)=m!$ if $\ell=2m+1$. Then

$$\begin{aligned} S&=\frac{1}{\Gamma(3/2)}[CN(t-\tau)^{1/2}]^2+\sum_{m\ge2}\frac{1}{\Gamma(m+1/2)}\left[CN(t-\tau)^{1/2}\right]^{2m}+\sum_{m\ge0}\frac{1}{\Gamma(m+1)}\left[CN(t-\tau)^{1/2}\right]^{2m+1}\\ &\le\frac{1}{\Gamma(3/2)}[CN(t-\tau)^{1/2}]^2+\sum_{m\ge2}\frac{1}{(m-1)!}\left[CN(t-\tau)^{1/2}\right]^{2m}+\sum_{m\ge0}\frac{1}{m!}\left[CN(t-\tau)^{1/2}\right]^{2m+1}.\end{aligned}$$

Whence

$$1+S\le\widetilde{C}e^{\widetilde{C}N^2(t-\tau)}.$$

Plugging this estimate into (2.7), we obtain

$$|\Phi(x,t;\xi,\tau)|\le\widetilde{C}N(t-\tau)^{-(n+1)/2}e^{-\frac{\lambda^*|x-\xi|^2}{t-\tau}+\widetilde{C}N^2(t-\tau)}. \tag{2.8}$$

With the help of Lemma 2.1, estimate (2.8) yields

$$\left|\int_\tau^t\int_{\mathbb{R}^n}Z(x,t;\eta,\sigma)\Phi(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma\right|\le\widetilde{C}N(t-\tau)^{-(n-1)/2}e^{-\frac{\lambda^*|x-\xi|^2}{t-\tau}+\widetilde{C}N^2(t-\tau)}. \tag{2.9}$$

Noting that this inequality can be rewritten as

$$\left|\int_\tau^t\int_{\mathbb{R}^n}Z(x,t;\eta,\sigma)\Phi(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma\right|\le\widetilde{C}\left[N(t-\tau)^{1/2}e^{-\widetilde{C}N^2(t-\tau)}\right](t-\tau)^{-n/2}e^{-\frac{\lambda^*|x-\xi|^2}{t-\tau}+2\widetilde{C}N^2(t-\tau)}$$

and, using that $\rho \to \rho e^{-\widetilde{C}\rho^2}$ is a bounded function on $[0,+\infty)$, we obtain

$$\left|\int_\tau^t \int_{\mathbb{R}^n} Z(x,t;\eta,\sigma)\Phi(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma\right| \le \widehat{C}(t-\tau)^{-n/2}e^{-\frac{\lambda^*|x-\xi|^2}{t-\tau}+2\widetilde{C}N^2(t-\tau)}. \tag{2.10}$$

An immediate consequence of (2.10) is

$$|E(x,t;\xi,\tau)| \le \widetilde{C}(t-\tau)^{-n/2}e^{-\frac{\lambda^*|x-\xi|^2}{t-\tau}+\widetilde{C}N^2(t-\tau)}. \tag{2.11}$$

In the rest of this section, we forsake the explicit dependence on N. So the constants below may depend on Ω, λ, A, and T.

From (2.9) we deduce in a straightforward manner that there exists $\delta > 0$ such that

$$E(x,t;\xi,\tau) \ge \widehat{C}(t-\tau)^{-n/2},\ \ (x,t;\xi,\tau) \in P^2,\ t>\tau,\ \widetilde{C}|x-\xi|^2 < t-\tau \le \delta. \tag{2.12}$$

By [16, Theorem 11, page 44], E is positive. Moreover, E satisfies the following identity, usually called the reproducing property,

$$E(x,t;\xi,\tau) = \int_{\mathbb{R}^n} E(x,t;\eta,\sigma)E(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta,\ \ x,\xi \in \mathbb{R}^n,\ \ t_0 \le \tau < \sigma < t \le t_1. \tag{2.13}$$

We can then paraphrase the proof of [15, Theorem 2.7, page 334] to get a Gaussian lower bound for E when $0 < t-\tau \le \delta$. To pass from $t-\tau \le \delta$ to $t-\tau \le T$, we use again an argument based on the reproducing property. We detail the same argument in the proof of Theorem 3.1.

We sum up our analysis in the following theorem.

Theorem 2.1. *The fundamental solution E satisfies the Gaussian two-sided bounds:*

$$\mathscr{G}_C(x-\xi,t-\tau) \le E(x,t;\xi,\tau) \le \mathscr{G}_{\widetilde{C}}(x-\xi,t-\tau),\ (x,t;\xi,\tau) \in P^2 \cap \{t>\tau\}. \tag{2.14}$$

Remark 2.1. Let us assume that conditions (i)-(iv) above hold in all of the whole space $\mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$ instead of Q only. Taking into account the exponential term in N^2 in (2.11), we prove, once again with the help of the reproducing property, the following global estimate in time:

$$e^{-\kappa N^2(t-\tau)}\mathscr{G}_C(x-\xi,t-\tau) \le E(x,t;\xi,\tau) \le e^{\kappa N^2(t-\tau)}\mathscr{G}_{\widetilde{C}}(x-\xi,t-\tau), \tag{2.15}$$

for some constant $\kappa > 0$, where $(x,t;\xi,\tau) \in (\mathbb{R}^n \times \mathbb{R})^2$.

We point out that (2.15) does not give the two-sided Gaussian bounds by Fabes and Stroock [15] for the divergence form operator $\partial_i(a_{ij}(x,t)\partial_j\,\cdot\,) - \partial_t$ with (C^∞-) smooth coefficients. This is not surprising since the arguments we used for proving (2.15) are not well adapted to divergence form operator. We note however that the approach developed in [15] for establishing Gaussian two-sided bounds is more involved.

Gaussian two-sided bounds were obtained by S. D. Eidel'man and F. O. Porper [13] when the coefficients of L satisfy the uniform Dini condition with respect to x. The main tool in [13] is a parabolic Harnack inequality. We refer also to [1], [14], [19] and [26], where the reader can find various results on bounds for the fundamental solution.

We mentioned in the Introduction that the Moser-Harnack inequality in [15] can be extended to a general divergence form parabolic operator. Let us show briefly how this Moser-Harnack inequality still holds for a general parabolic operator. First, we recall that a Dirichlet Green function was constructed in [20, formula (16.7), page 408] as a perturbation of the fundamental solution by a double-layer potential. Therefore, in light of [20, formula (16.10), page 409] and [20, estimate (16.14), page 411], we can assert that [15, Lemma 5.1] remains true for our L. Next, paraphrasing the proofs of [15, Lemma 5.2 and Theorem 5.4] (more detailed proofs are given in [30]), we can state the following Moser-Harnack inequality.

Theorem 2.2. *Let $\eta,\mu,\varrho \in (0,1)$. Then there is $M > 0$, depending on n, λ, A, η, μ and ϱ such that for all $(x,s) \in \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}$, all $R > 0$ and all non negative $u \in C^{2,1}(\overline{B}(x,R) \times [s-R^2,s])$ satisfying $Lu = 0$ one has*

$$u(y,t) \le Mu(x,s)\ \ \textit{for all}\ (y,t) \in \overline{B}(x,\varrho R) \times [s-\eta R^2, s-\mu R^2].$$

3. Gaussian lower bound for the Neumann Green function

We recall that the derivative of $U = U(x,t)$ at $(x,t) \in \partial\Omega \times [t_0, t_1]$ in the conormal direction is given by

$$\partial_\nu U(x,t) = a_{ij}(x,t)\mathbf{n}_j(x)\partial_i U(x,t),$$

where $\mathbf{n}(x) = (\mathbf{n}_1(x), \ldots, \mathbf{n}_n(x))$ is the unit outward normal vector at x.

For $\tau \in [t_0, t_1[$, we set $Q_\tau = \Omega \times (\tau, t_1)$, $\Sigma_\tau = \partial\Omega \times (\tau, t_1)$ and we consider the Neumann initial-boundary value problem (abbreviated to IBVP in the sequel) for the operator L:

$$\begin{cases} Lu = 0 & \text{in } Q_\tau, \\ u(\cdot\,,\tau) = \psi & \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu u = 0 & \text{on } \Sigma_\tau. \end{cases} \tag{3.1}$$

From [16, Theorem 2, page 144] and its proof, for any $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$, the IBVP (3.1) has a unique solution $u \in C^{1,0}(\overline{Q}_\tau) \cap C^{2,1}(Q_\tau)$ given by

$$u(x,t) = \int_\tau^t \int_{\partial\Omega} E(x,t;\xi,\sigma)\varphi(\xi,\sigma)d\xi d\sigma + \int_\Omega E(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi. \tag{3.2}$$

Here

$$\varphi(x,t) = F_\tau(x,t) - 2\sum_{\ell\geq 1}\int_\tau^t \int_{\partial\Omega} M_\ell(x,t;\xi,\sigma)F_\tau(\xi,\sigma)d\xi d\sigma, \tag{3.3}$$

with

$$F_\tau(x,t) = -2\int_\Omega \partial_\nu E(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi,$$
$$M_1 = -2\partial_\nu E,$$
$$M_{\ell+1}(x,t;\xi,\tau) = \int_\tau^t \int_{\partial\Omega} M_1(x,t;\eta,\sigma)M_\ell(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma.$$

For $(x,t) \in \Sigma_\tau$ and $\xi \in \Omega$, let

$$\mathcal{N}(x,t;\xi,\tau) = -2\partial_\nu E(x,t;\xi,\tau) - 2\sum_{\ell\geq 1}\int_\tau^t \int_{\partial\Omega} M_\ell(x,t;\eta,\sigma)\partial_\nu E(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma.$$

Assume for the moment (see the proof below) that

$$\varphi(x,t) = \int_\Omega \mathcal{N}(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi. \tag{3.4}$$

We set

$$G(x,t,\xi,\tau) = \int_\tau^t \int_{\partial\Omega} E(x,t;\eta,\sigma)\mathcal{N}(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma + E(x,t;\xi,\tau). \tag{3.5}$$

It follows from Fubini's theorem that

$$u(x,t) = \int_\Omega G(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi. \tag{3.6}$$

The function G is called the Neumann Green function associated to the equation $Lu = 0$ in Q.

We have, for any $0 \leq \psi \in C_0^\infty(\Omega)$, $u \geq 0$, according to the maximum principle (see for instance [23, Theorem 2.9, page 15] and remarks following it). Whence, $G \geq 0$.

From the uniqueness of the solution of the IBVP (3.1), we have also

$$\int_\Omega G(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi = \int_\Omega G(x,t;\eta,\sigma)d\eta \int_\Omega G(\eta,\sigma;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi \;\text{ for any } \psi \in C_0^\infty(\Omega),\ \tau < \sigma < t.$$

Therefore,

$$G(x,t;\xi,\tau)=\int_\Omega G(x,t;\eta,\sigma)G(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta,\ \tau<\sigma<t. \tag{3.7}$$

That is, G has the reproducing property.

We note that when $c=0$, G satisfies in addition

$$\int_\Omega G(x,t;\xi,\tau)d\xi=1.$$

The key point in the proof of our Gaussian lower bound for G is the following lemma.

Lemma 3.1. *For $1/2<\mu<\frac{n}{2}$, we have*

$$|\mathcal{N}(x,t;\xi,\tau)|\le C(t-\tau)^{-\mu}|x-\xi|^{-n+2\mu},\ (x,t)\in\Sigma_\tau,\ \xi\in\Omega,\ x\neq\xi. \tag{3.8}$$

The lemma below appears in [16, page 137] as Lemma 1. It is needed for proving Lemma 3.1.

Lemma 3.2. *Let $0<a,b<n-1$ with $a+b\neq n-1$. Then*

$$\int_{\partial\Omega}|x-\eta|^{-a}|\eta-\xi|^{-b}d\eta\le\left\{\begin{array}{ll}\widehat{C}|x-\xi|^{n-1-(a+b)} & \textit{if } a+b>n-1\\ \widehat{C} & \textit{if } a+b<n-1.\end{array}\right. \tag{3.9}$$

Proof of Lemma 3.1. Since Ω is of class $C^{1,1}$, we obtain by paraphrasing the proof of [16, formula (2.12), page 137]:

$$|\partial_\nu E(x,t;\xi,\tau)|\le C(t-\tau)^{-\mu}|x-\xi|^{-n+2\mu},$$

for any $\mu>0$, and then

$$|M_1(x,t;\xi,\tau)|\le C(t-\tau)^{-\mu}|x-\xi|^{-n+2\mu}. \tag{3.10}$$

We assume first that $1/2<\mu<1$. Since

$$|M_2(x,t;\xi,\tau)|\le\int_\tau^t\int_{\partial\Omega}|M_1(x,t;\eta,\sigma)||M_1(\eta,\sigma;\xi,\tau)|d\eta d\sigma,$$

Hence, (3.10) leads

$$|M_2(x,t;\xi,\tau)|\le C^2\int_\tau^t(t-\sigma)^{-\mu}(\sigma-\tau)^{-\mu}d\sigma\int_{\partial\Omega}|x-\eta|^{-n+2\mu}|\xi-\eta|^{-n+2\mu}d\eta. \tag{3.11}$$

By Lemma 3.2,

$$\int_{\partial\Omega}|x-\eta|^{-n+2\mu}|\xi-\eta|^{-n+2\mu}d\eta\le\left\{\begin{array}{ll}\widehat{C}|x-\xi|^{-n+4\mu-1} & \text{if } n\ge 3 \text{ or } n=2 \text{ and } \frac12<\mu<\frac34,\\ \widehat{C} & \text{if } n=2 \text{ and } \frac34<\mu<1.\end{array}\right. \tag{3.12}$$

On the other hand

$$\int_\tau^t(t-\sigma)^{-\mu}(\sigma-\tau)^{-\mu}d\sigma=(t-\tau)^{-\mu+(1-\mu)}\int_0^1 s^{-\mu}(1-s)^{1-\mu}ds=(t-\tau)^{-\mu+(1-\mu)}B(1-\mu,1-\mu). \tag{3.13}$$

We plug (3.12) and (3.13) into (3.11), and we obtain

$$|M_2(x,t;\xi,\tau)|\le C^2\widehat{C}(t-\tau)^{-\mu+(1-\mu)}B(1-\mu,1-\mu)|x-\xi|^{-n+2\mu+(2\mu-1)},\ \text{if } n\ge 3 \text{ or } n=2 \text{ and } \frac12<\mu<\frac34$$

and

$$|M_2(x,t;\xi,\tau)|\le C^2\widehat{C}(t-\tau)^{-\mu+(1-\mu)}B(1-\mu,1-\mu),\ \text{if } n=2 \text{ and } \frac34<\mu<1.$$

Let $\ell(n)$ be the smallest integer ℓ so that $n+1<2\ell$ and fix $\frac{n+1}{2\ell(n)}<\mu<1$. Then an induction argument yields

$$|M_\ell(x,t;\xi,\tau)|\le C^\ell\widehat{C}^{\ell-1}(t-\tau)^{-\mu+(\ell-1)(1-\mu)}\frac{\Gamma(1-\mu)^\ell}{\Gamma(\ell(1-\mu))},\ \ \ell\ge\ell(n).$$

By Stirling's formula

$$\Gamma(\ell(1-\mu)) \sim (e^{-1}(\ell(1-\mu)-1))^{\ell(1-\mu)-1}\sqrt{2\pi(\ell(1-\mu)-1))} \text{ as } \ell \to +\infty,$$

implying that the series

$$S = \sum_{\ell \geq \ell(n)} C^{\ell}\widehat{C}^{\ell-1}T^{-\mu+(\ell-1)(1-\mu)}\frac{\Gamma(1-\mu)^{\ell}}{\Gamma(\ell(1-\mu))}$$

converges.

Clearly,

$$|\mathcal{N}(x,t;\xi,\tau)| \leq \sum_{\ell=1}^{\ell(n)-1} |M_\ell(x,t;\xi,\tau)| + S.$$

Therefore, it is enough to prove that

$$\widetilde{\mathcal{N}}(x,t;\xi,\tau) = \sum_{\ell=1}^{\ell(n)-1} |M_\ell(x,t;\xi,\tau)|$$

satisfies (3.8). To this end, we observe that

$$\begin{aligned}|M_2(x,t;\xi,\tau)| \leq \int_\tau^{(\tau+t)/2}\int_{\partial\Omega} |M_1(x,t;\eta,\sigma)||M_1(\eta,\sigma;\xi,\tau)|d\eta d\sigma \\ + \int_{(\tau+t)/2}^{t}\int_{\partial\Omega} |M_1(x,t;\eta,\sigma)||M_1(\eta,\sigma;\xi,\tau)|d\eta d\sigma.\end{aligned}$$

Assume that $1/2 < \mu < n/2$ and pick $1/2 < \alpha < \min(1,(n/2-\mu)+1/2)$. From Lemma 3.2, we have

$$\begin{aligned}\int_\tau^{(\tau+t)/2}\int_{\partial\Omega} |M_1(x,t;\eta,\sigma)||M_1(\eta,\sigma;\xi,\tau)|d\eta d\sigma &\leq C^2\int_\tau^{(\tau+t)/2}(\sigma-\tau)^{-\alpha}(t-\sigma)^{-\mu}d\sigma \\ &\qquad \int_{\partial\Omega}|x-\eta|^{-n+2\mu}|\xi-\eta|^{-n+2\alpha}d\eta \\ &\leq C^2\left(\frac{t-\tau}{2}\right)^{-\mu}\int_\tau^{(\tau+t)/2}(\sigma-\tau)^{-\alpha}d\sigma|x-\xi|^{-n+2\mu+2\alpha-1} \\ &\leq C^2\left(\frac{t-\tau}{2}\right)^{-\mu-\alpha+1}|x-\xi|^{-n+2\mu+2\alpha-1} \\ &\leq C'(t-\tau)^{-\mu}|x-\xi|^{-n+2\mu}.\end{aligned}$$

Similarly,

$$\int_{(\tau+t)/2}^{t}\int_{\partial\Omega} |M_1(x,t;\eta,\sigma)||M_1(\eta,\sigma;\xi,\tau)|d\eta d\sigma \leq C(t-\tau)^{-\mu}|x-\xi|^{-n+2\mu}.$$

Thus, M_2 satisfies (3.8). We repeat the previous argument to deduce that also $\widetilde{\mathcal{N}}$ obeys (3.8). □

Proof of (3.4). Let

$$\mathcal{N}_k(x,t;\xi,\tau) = -2\partial_\nu E(x,t;\xi,\tau) - 2\sum_{\ell\geq 1}^{k}\int_\tau^t\int_{\partial\Omega} M_\ell(x,t;\eta,\sigma)\partial_\nu E(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma,$$

$$\varphi_k(x,t) = -2F_\tau(x,t) - 2\sum_{\ell\geq 1}^{k}\int_\tau^t\int_{\partial\Omega} M_\ell(x,t;\xi,\sigma)F_\tau(\xi,\sigma)d\xi d\sigma.$$

In light of Lemma 3.2 and with the help of Lebesgue's dominated convergence theorem, we can assert that

$$\int_\Omega \mathcal{N}_k(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi \longrightarrow \int_\Omega \mathcal{N}(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi \text{ as } k \longrightarrow +\infty.$$

According to Funini's theorem

$$\varphi_k(x,t)=\int_\Omega \mathcal{N}_k(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi.$$

But $\varphi_k(x,t)\to\varphi(x,t)$ when k tends to infinity. Then the uniqueness of the limit yields

$$\varphi(x,t)=\int_\Omega \mathcal{N}(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi.$$

□

We are now ready to prove

Theorem 3.1. *Under the assumption that Ω obeys the chain condition, the Neumann Green function G satisfies the Gaussian lower bound:*

$$\mathscr{G}_C(x-\xi,t-\tau)\le G(x,t;\xi,\tau),\ \ (x,t;\xi,\tau)\in Q^2\cap\{t>\tau\}. \tag{3.14}$$

Proof. Let

$$G_0(x,t;\xi,\tau)=\int_\tau^t\int_{\partial\Omega}E(x,t;\eta,\sigma)\mathcal{N}(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma.$$

From the Gaussian upper bound for E we obtain in a straightforward way that, for any $\beta>0$,

$$|E(x,t;\xi,\tau)|\le C(t-\tau)^{-\beta}|x-\xi|^{-n+2\beta}.$$

On the other hand, by Lemma 3.1,

$$|\mathcal{N}(\eta,\sigma;\xi,\tau)|\le C(t-\tau)^{-\mu}|x-\xi|^{-n+2\mu}.$$

where $\frac{1}{2}<\mu<\frac{n}{2}$.

We fix $0<\epsilon<\frac{1}{2}$ and $0<\alpha<\frac{1}{2}$. In the preceding inequalities, we take $\mu=\frac{n}{2}-\epsilon$ and $\beta=1+\epsilon-\alpha$. In light of the fact that $-n+2\mu+2\beta-1=1-2\alpha>0$, we get from Lemma 3.2

$$|G_0(x,t;\xi,\tau)|\le C(t-\tau)^{-n/2+\alpha}.$$

But, we know from (2.12) that

$$E(x,t;\xi,\tau)\ge C(t-\tau)^{-n/2},\ \ (x,t;\xi,\tau)\in P^2,\ t>\tau,\ \widehat{C}|x-\xi|^2<t-\tau.$$

Hence,

$$\begin{aligned}G(x,t;\xi,\tau)&\ge E(x,t;\xi,\tau)-|G_0(x,t;\xi,\tau)|\\&\ge C(t-\tau)^{-n/2}(1-\widetilde{C}(t-\tau)^{\alpha}),\ t>\tau,\ \widehat{C}|x-\xi|^2<t-\tau.\end{aligned}$$

Consequently, we find $\delta>0$ so that

$$G(x,t;\xi,\tau)\ge C(t-\tau)^{-n/2},\ \ (x,t;\xi,\tau)\in Q^2,\ 0<t-\tau\le\delta,\ \widetilde{C}|x-\xi|^2<t-\tau.$$

Or equivalently

$$G(x,t;\xi,\tau)\ge C(t-\tau)^{-n/2},\ \ (x,t;\xi,\tau)\in Q^2,\ 0<t-\tau\le\delta,\ |x-\xi|<\widehat{C}(t-\tau)^{1/2}. \tag{3.15}$$

As Ω has the chain condition, there exists a constant $c>0$, independent on x and ξ, such that for any positive integer k there exists a sequence $(x_i)_{0\le i\le k}$ of points in Ω so that $x_0=x$, $x_k=\xi$ and

$$|x_{i+1}-x_i|\le\frac{c}{k}|x-\xi|,\ \ 0\le i\le k-1. \tag{3.16}$$

When $2c|x-\xi|\le\widehat{C}(t-\tau)^{1/2}$ (implying $|x-\xi|\le\widehat{C}(t-\tau)^{1/2}$), (3.14) follows immediately from (3.15). Therefore we may assume that $2c|x-\xi|>\widehat{C}(t-\tau)^{1/2}$. We choose $m\ge2$ to be the smallest integer satisfying

$$2c\frac{|x-y|}{m^{1/2}}\le\widehat{C}(t-\tau)^{1/2}.$$

Let $(x_i)_{0\le i\le m}$ be the sequence given by (3.16) when $k=m$ and

$$r=\frac{1}{4}\widehat{C}\left(\frac{t-\tau}{m}\right)^{1/2}.$$

In light of the reproducing property and the positivity of G, we obtain

$$\begin{aligned}G(x,t;\xi,\tau)&=\int_\Omega\dots\int_\Omega G\left(x,t;\xi_1,\frac{(m-1)t+\tau}{m}\right)\dots G\left(\xi_{m-1},\frac{t+(m-1)\tau}{m};\xi,\tau\right)d\xi_1\dots d\xi_{m-1}\\&\ge\int_{B(x_1,r)\cap\Omega}\dots\int_{B(x_{m-1},r)\cap\Omega}G\left(x,t;\xi_1,\frac{(m-1)t+\tau}{m}\right)\dots\\&\qquad\dots G\left(\xi_{m-1},\frac{t+(m-1)\tau}{m};\xi,\tau\right)d\xi_1\dots d\xi_{m-1}.\end{aligned}\tag{3.17}$$

Using that Ω is $C^{1,1}$-smooth, we obtain from the result in Appendix A: there exist two positive constants d and r_0 such that, for any $z\in\overline{\Omega}$ and $0<\rho\le r_0$,

$$d\rho^n\le|B(z,\rho)\cap\Omega|.\tag{3.18}$$

We mention that Choi and Kim [8] observed that this condition is necessary for domains having a De Giorgi-Nash-Moser type estimate at the boundary.

In the sequel, replacing $\widehat{C}$ by a smaller constant, we may assume that $r\le r_0$.

Let $\xi_0=x$, $\xi_i\in B(x_i,r)$ and $\xi_m=\xi$. Then we have

$$|\xi_{i+1}-\xi_i|\le|x_{i+1}-x_i|+2r\le c\frac{|x-\xi|}{m}+2r\le c\frac{|x-\xi|}{m^{1/2}}+2r\le 4r,\;\;0\le i\le m-1.$$

Whence,

$$|\xi_{i+1}-\xi_i|\le\widehat{C}\left(\frac{t-\tau}{m}\right)^{1/2},\;\;0\le i\le m-1.$$

It follows from (3.15) and (3.18) that

$$\begin{aligned}G(x,t;\xi,\tau)&\ge\int_{B(x_1,r)\cap\Omega}\dots\int_{B(x_{m-1},r)\cap\Omega}C^m\left(\frac{t-\tau}{m}\right)^{-nm/2}d\xi_1\dots d\xi_{m-1}\\&\ge(dr^n)^{m-1}C^m\left(\frac{t-\tau}{m}\right)^{-nm/2}\\&\ge d^{m-1}\left[\frac{\widehat{C}^2}{16}\left(\frac{t-\tau}{m}\right)\right]^{n(m-1)/2}C^m\left(\frac{t-\tau}{m}\right)^{-nm/2}\\&\ge\widetilde{C}C^m(t-\tau)^{-n/2}.\end{aligned}$$

Hence

$$G(x,t;\xi,\tau)\ge\widetilde{C}e^{-Cm}(t-\tau)^{-n/2}.\tag{3.19}$$

From the definition of m, we have

$$m-1\le\left(\frac{2c}{\widehat{C}}\right)^2\frac{|x-y|^2}{t-\tau}.\tag{3.20}$$

Finally, a combination of (3.19) and (3.20) leads to (3.14) when $t-\tau\le\delta$.

We complete the proof by showing that we can remove the assumption $t-\tau\le\delta$ in (3.15). Let then $0<t-\tau\le T$, such that $t-\tau>\delta$, and let $m\ge 2$ be the smallest integer such that $\delta^{-1}(t-\tau)\le m$. We set

$$r=r_0T^{-1/2}m^{-1/2}(t-\tau)^{1/2}\tag{3.21}$$

and we denote by p the smallest integer satisfying

$$\frac{2cD}{rm} \le p, \text{ with } D = \mathrm{diam}(\Omega).$$

If we choose $k = pm$ in (3.16), we obtain

$$|x_{i+1} - x_i| \le \frac{c|x-\xi|}{pm} \le \frac{cD}{pm} \le r/2.$$

Let us denote by (3.17*) the inequality (3.17) in which we take $r/2$ in place of r, with r given as in (3.21), and m changed by pm.

Taking into account that

$$p < 1 + 2cDr_0^{-1}T^{1/2}\delta^{-1/2} = p^*,$$

we get, for $\xi_i \in B(x_i, r)$, $1 \le i \le m-1$.

$$\frac{pm|\xi_{i+1} - \xi_i|^2}{t-\tau} \le \frac{pmr^2}{t-\tau} < p^* r_0^2 T^{-1}. \tag{3.22}$$

As $(pm)^{-1}(t-\tau) \le \delta$, (3.14) holds true. Therefore, in light of (3.22), we obtain from (3.17*)

$$\begin{aligned}
G(x,t;\xi,\tau) &\ge \left(d\left[2^{-1}r_0T^{-1/2}m^{-1/2}(t-\tau)^{1/2}\right]^n\right)^{pm-1} C^{pm}\left[(pm)^{-1}(t-\tau)\right]^{-pnm/2} \\
&\ge \left(d\left[2^{-1}r_0T^{-1/2}\right]^n\right)^{pm-1} C^{pm} m^{n/2} p^{pnm/2}(t-\tau)^{-n/2} \\
&\ge \left(d\left[2^{-1}r_0T^{-1/2}\right]^n\right)^{pm-1} (t-\tau)^{-n/2} \\
&\ge \widetilde{C}\widehat{C}^{pm}(t-\tau)^{-n/2} \\
&\ge \widetilde{C}e^{-pm|\ln \widehat{C}|}(t-\tau)^{-n/2} \\
&\ge \widetilde{C}e^{-p^*m^*|\ln \widehat{C}|}(t-\tau)^{-n/2}, \text{ with } m^* = \delta^{-1}T + 1.
\end{aligned}$$

This estimate completes the proof. □

Theorem 3.1 can be easily extended to a Robin Green function. Indeed, if we replace the Neumann boundary condition by the following Robin boundary condition:

$$\partial_\nu u + q(x,t)u = 0 \text{ in } \Sigma_\tau,$$

where $q \in C(\Sigma_\tau)$, then $\mathcal{N}$ has to be changed by

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}_q(x,t;\xi,\tau) &= -2[\partial_\nu E(x,t;\xi,\tau) + q(x,t)E(x,t;\xi,\tau)] \\
&\quad - 2\sum_{\ell\ge 1}\int_\tau^t \int_{\partial\Omega} M_\ell(x,t;\eta,\sigma)[\partial_\nu E(\eta,\sigma;\xi,\tau) + q(\eta,\sigma)E(\eta,\sigma;\xi,\tau)]d\eta d\sigma.
\end{aligned}$$

Here

$$\begin{aligned}
M_1(x,t;\xi,\tau) &= -2[\partial_\nu E(x,t;\xi,\tau) + q(x,t)E(x,t;\xi,\tau)] \\
M_{\ell+1}(x,t;\xi,\tau) &= \int_\tau^t \int_{\partial\Omega} M_1(x,t;\eta,\sigma)M_\ell(\eta,\sigma;\xi,\tau)d\eta d\sigma, \quad \ell \ge 1.
\end{aligned}$$

Apart the positivity of the Green function, which can be obtained by an adaptation of [9, Proposition 3.2], one can see without any difficulty, that the rest of our analysis holds true when $\mathcal{N}$ is replaced by $\mathcal{N}_q$.

We already mentioned that, for parabolic operators with time-independent coefficients, a Neumann Green function is nothing else but a Neumann heat kernel. Let us then consider a parabolic operator of the form

$$\mathcal{L} = \partial_j(a_{ij}(x)\partial_i\,\cdot) + b_k(x)\partial_k + c(x) - \partial_t, \tag{3.23}$$

so that the following assumptions are satisfied:

(i') the matrix $(a_{ij}(x))$ is symmetric for any $x \in \overline{\Omega}$,

(ii') $a_{ij} \in W^{1,\infty}(\Omega)$, $\partial_k a_{ik},\ b_k,\ c \in C^1(\overline{\Omega})$,

(iii') $a_{ij}(x)\xi_i\xi_j \geq \lambda|\xi|^2$, $(x,t) \in \overline{\Omega},\ \xi \in \mathbb{R}^n$,

(iv') $\|a_{ij}\|_{W^{1,\infty}(\Omega)} + \|\partial_k a_{ik} + b_k\|_{L^\infty(\Omega)} + \|c\|_{L^\infty(\Omega)} \leq A$,

where $\lambda > 0$ and $A > 0$ are two given constants.

Here again, the assumptions on the coefficients of $\mathcal{L}$ are not necessarily the best possible.

Let $\mathfrak{a}$ be the unbounded bilinear form defined by $D(\mathfrak{a}) = H^1(\Omega)$ and

$$\mathfrak{a}(u,v) = \int_\Omega a_{ij}\partial_i u \partial_j v dx + \int_\Omega b_k \partial_k u v dx + \int_\Omega cuvdx, \quad u,v \in D(\mathfrak{a}).$$

We associate to $\mathfrak{a}$ the unbounded operator $\mathcal{A}$ given by

$$D(\mathcal{A}) = \{u \in L^2(\Omega);\ \exists v \in L^2(\Omega) : \mathfrak{a}(u,\varphi) = (v,\varphi)_2,\ \varphi \in H^1(\Omega)\},\ \mathcal{A}u := v.$$

Here $(\cdot,\cdot)_2$ denotes the usual scalar product of $L^2(\Omega)$.

We have

$$\int_\Omega b_k \partial_k u u \leq \frac{2}{\lambda}\int_\Omega |\nabla u|^2 + \left(\frac{8\sup_k \|b_k\|_{L^\infty(\Omega)}}{\lambda}\right)\int_\Omega u^2, \quad u \in H^1(\Omega).$$

This and (iii') entail that $\mathfrak{a}+\kappa$ is accretive for a sufficiently large $\kappa > 0$. Since $\mathfrak{a}$ is clearly densely defined and continuous on $H^1(\Omega)$, we derive from [27, Theorem 1.52, page 29] that $-\mathcal{A}$ is the generator of an holomorphic semigroup $e^{-t\mathcal{A}}$.

Let $Q = \Omega \times (0,T)$, $\Sigma = \partial\Omega \times (0,T)$, $\psi \in C_0^\infty(\Omega)$ and $u \in C^{1,0}(\overline{Q}) \cap C^{2,1}(Q)$ ([16, Theorem2, page 144]) be the unique solution of the IBVP

$$\begin{cases} \mathcal{L}u = 0 & \text{in } Q, \\ u(\cdot\,,0) = \psi & \text{in } \Omega, \\ \partial_\nu u = 0 & \text{on } \Sigma. \end{cases} \tag{3.24}$$

By [3, Theorem 10.9, page 341], $u \in L^2(0,T;H^1(\Omega) \cap C([0,T];L^2(\Omega))$, $u' \in L^2(0,T;[H^1(\Omega)]')$ and it is the unique solution of

$$\begin{cases} \langle u'(t), v\rangle + \mathfrak{a}(u(t),v) = 0 \ \text{ a.e. } t \in [0,T],\ v \in H^1(\Omega), \\ u(0) = \varphi \end{cases} \tag{3.25}$$

where $\langle\cdot,\cdot\rangle$ is the duality pairing between $H^1(\Omega)$ and its dual space $[H^1(\Omega)]'$.

We set $\widetilde{u}(t) = e^{-t\mathcal{A}}\psi$, $t \geq 0$. By using $\widetilde{u}'(t) = \mathcal{A}u(t)$, $t \in [0,T]$, we obtain in a straightforward manner

$$\langle \widetilde{u}'(t), v\rangle + \mathfrak{a}(\widetilde{u}(t),v) = 0, \quad t \in [0,T],\ v \in H^1(\Omega),$$

Using that $u(0) = \widetilde{u}(0)$, we get from the uniqueness of the solution of problem (3.25) that $u = \widetilde{u}$. Hence,

$$e^{-t\mathcal{A}}\psi(x) = \int_\Omega G(x,t;\xi,0)\psi(\xi)d\xi,\ 0 < t \leq T.$$

We rewrite this equality as follows:

$$e^{-t\mathcal{A}}\psi(x) = \int_\Omega K(x,\xi,t)\psi(\xi)d\xi,\ 0 < t \leq T.$$

The function

$$K(x,\xi,t) = G(x,t;\xi,0)$$

is usually called the heat kernel of the semigroup $e^{-t\mathcal{A}}$.

We have as an immediate consequence of Theorem 3.1:

Corollary 3.1. *When Ω possesses the chain condition, the Neumann heat kernel K satisfies the Gaussian lower bound:*

$$\mathscr{G}_C(x-\xi,t) \le K(x,\xi,t), \quad (x,\xi)\in\Omega^2,\ 0<t\le T. \tag{3.26}$$

A Gaussian lower bound for the Neumann heat kernel was proved in [10] when L is the Laplace operator. The key point is the Hölder continuity of $x \longrightarrow K(x,\xi,t)$ which relies on the fact that $\mu-\mathcal{A}$ is an isomorphism from $H^s(\Omega)$ into $H^{s-2}(\Omega)$, for large μ and $s>n/2+1$. We note that a quick examination of the proof in [10] shows that this result can be extended to a divergence form operator with C^∞-smooth coefficients.

We end this section by showing that we can obtain a strong maximum from Theorem 3.1. Let $\psi\in C(\overline{\Omega})$, $f\in C(\overline{Q}_\tau)$, $g\in C(\overline{\Sigma}_\tau)$ and consider the IBVP

$$\begin{cases} Lu=f & \text{in } Q_\tau,\\ u(\cdot\,,\tau)=\psi & \text{in } \Omega,\\ \partial_\nu u = g & \text{on } \Sigma_\tau. \end{cases} \tag{3.27}$$

Corollary 3.2. *We assume that $\psi\ge 0$, $f\ge 0$, $g\ge 0$ and at least one of the functions ψ, f and g is non identically equal to zero. If $u\in C^{0,1}(\overline{Q}_\tau)\cap C^{2,1}(Q_\tau)$ is the solution of the IBVP (3.27), then*

$$u>0 \text{ in } \Omega\times]\tau,t_1].$$

Proof. Follows from Theorem 3.1 since (see for instance [16, formula (3.5), page 144])

$$u(x,t)=\int_\Omega G(x,t;\xi,\tau)\psi(\xi)d\xi+\int_\tau^t\int_\Omega G(x,t;\xi,s)f(\xi,s)d\xi ds+\int_\tau^t\int_{\partial\Omega}G(x,t;\xi,s)g(\xi,s)dS_\xi ds.$$

□

Appendix A

In this appendix we prove (3.18). Henceforth, Ω is a bounded domain of $\mathbb{R}^n$ with boundary Γ.

Following [18, Definition 2.4.1, page 50], we introduce the notation

$$\mathscr{C}(y,\xi,\epsilon)=\{z\in\mathbb{R}^n;\ (z-y)\cdot\xi\ge(\cos\epsilon)|z-y|,\ 0<|y-z|<\epsilon\},$$

where $y\in\mathbb{R}^n$, $\xi\in\mathbb{S}^{n-1}$ and $0<\epsilon$. That is, $C(y,\xi,\epsilon)$ is the cone, of dimension ϵ, with vertex y, aperture ϵ and directed by ξ.

We say that Ω has the ϵ-cone property if

(A.1) for any $x\in\Gamma$, there exists $\xi_x\in\mathbb{S}^{n-1}$ so that, for all $y\in\overline{\Omega}\cap B(x,\epsilon)$, $\mathscr{C}(y,\xi_x,\epsilon)\subset\Omega$.

Assume that Ω has the ϵ-cone property, for some $0<\epsilon$. By using the compactness of Γ, we find a finite number of points of Γ, $x_1,\dots x_p$, so that $\Gamma=\bigcup_k[\Gamma\cap B(x_k,\epsilon/2)]$ and (A.1) is satisfied for each x_i, $i=1,\dots,p$. Let $K=\overline{\Omega}\setminus\bigcup_k B(x_k,\epsilon/2)$. Then, $0<\varrho=\operatorname{dist}(K,\Gamma)(<\epsilon)$ and therefore, for each $x\in K$, we have $B(x,\varrho)\subset\Omega$. We deduce from this observation that, for each $x\in\overline{\Omega}$ and $0<r<\varrho$, $\Omega\cap B(x,r)$ contains a cone of dimension r and aperture ϵ. It is then straightforward to get the following inequality:

$$|\Omega\cap B(x,r)|\ge cr^n,\quad 0<r<\varrho,$$

for some constant $c=c(n,\varrho)$.

We complete the proof of (3.18) by using the following theorem.

Theorem A.1. *Ω has the ϵ-cone property, for some $0<\epsilon$, if and only if its boundary Γ is Lipschitz.*

We refer to [18, Theorem 2.4.7, page 53] for a detailed proof of this theorem.

References

[1] D. G. Aronson, *Bounds for the fundamental solution of a parabolic equation*, Bulletin of American Math. Soc. 73 (1967), 890-896.

[2] D. G. Aronson, *Non-negative solutions of linear parabolic equations*, Ann. Scuola Norm. Sup. Pisa 22 (3) (1968), 607-694.

[3] H. Brézis, *Functional analysis, Sobolev spaces and partial differential equations*, Springer-verlag, New York, 2011.

[4] K. Burdzy, Z.-Q. Chen and J. Sylvester, *The heat equation and reflected Brownian motion in time-dependent domains*, Ann. Probab. 32 (2004), 775-804.

[5] I. Chavel, *Heat diffusion in insulated convex domains*, J. London Math. Soc., 34 (3) (1986) 473-478.

[6] S. Cho, *Two-sided global estimates of Green's function of parabolic equations*, Potential Anal. 25 (2006), 387-398.

[7] S. Cho, S. Kim and H. Park, *Two-sided estimates on Dirichlet heat kernels for time-dependent parabolic operators with singular drifts*, J. Diffent. Equat. 252 (2012), 1101-1145.

[8] J. Choi and S. Kim , *Greens function for second order parabolic systems with Neumann boundary condition*, J. Diffent. Equat. 252 (2013), 2834-2860.

[9] M. Choulli, *On the determination of an unknown boundary function in a parabolic equation*, Inverse Problems 15 (1999) 659-667.

[10] M. Choulli, E. M. Ouhabaz and M. Yamamoto, *Stable determination of a semilinear term in a parabolic equation* Commun. Pure Appl. Anal. 5 (3) (2006) 447-462.

[11] D. Daners, *Heat kernel estimates for operators with boundary conditions*, Math. Nachr. 217 (2000), 13-41.

[12] E. B. Davies, *Heat kernels and spectral theory*, Cambridge Tracts in Math. 92, Cambridge University Press, London 1989.

[13] S. D. Eidel'man and F. O. Porper, *Two-sided estimates for fundamental solutions of second-order parabolic equations, and some applications,* Uspekhi. Mat. Nauk 39 (3) (1984), 107-156 ; Russian Math. Surveys 39 (3) (1984), 119-178.

[14] E. Fabes, *Gaussian upper bounds on fundamental solutions of parabolic equations ; the method of Nash*, Dirichlet forms (Varenna, 1992), 120, Lecture Notes in Math., 1563, Springer, Berlin, 1993.

[15] E. Fabes and D. W. Stroock, *A new proof of Moser's parabolic Harnack inequality using the old ideas of Nash*, Arch. Rat. Mech. Anal. 96 (1986), 327-338.

[16] A. Friedman, *Partial differential equations of parabolic type*, Englewood Cliffs NJ, Prentice-Hall, 1964.

[17] A. Grigor'yan, *Heat kernel and analysis on manifolds*, AMS/IP Studies in Advanced Mathematics 47, American Mathematical Society, Providence, RI ; International Press, Boston, MA, 2009.

[18] A. Henrot and M. Pierre, *Variation et optimisation de formes*, Mathématiques et Applications, vol. 48, Springer-Verlag, Berlin, 2005.

[19] S. Itô, *Diffusion equations*, Transaction of Mathematical Monographs 114, Providence, RI, 1991.

[20] O. A. Ladyzhenskaja, V. A. Solonnikov and N. N. Ural'tzeva, *Linear and quasilinear equations of parabolic type*, Nauka, Moscow, 1967 in Russian ; English translation: American Math. Soc., Rovidence, RI, 1968.

[21] E. E. Levi, *Sulle equazioni lineari totalmente alle derivate parziali,* Rend. Circ. Mat. Palermo, 24 (1907), 275-317.

[22] P. Li and S.T. Yau, *On the parabolic kernel of the Schrödinger operator*, Acta Math. 156 (1986), 153-201.

[23] G. Lieberman, *Second order parabolic differential equations*, World Scientifique Publishing, Singapore, 1996.

[24] J. Moser, *Harnack inequality for parabolic differential equations*, Commun. Pure Appl. Math. 17 (1964), 101-134 ; Correction to *"Harnack inequality for parabolic differential equations"*, Commun. Pure Appl. Math. 20 (1967) 231-236.

[25] J. Nash, *Continuity of solutions of parabolic and elliptic equations*, American J. Math. 80 (1958), 931-954.

[26] J. R. Norris and D. W. Stroock, *Estimates on the fundamental solution to heat flows with uniformly elliptic coefficients*, Proc. London Math. Soc. 62 (3) (1991), 373-402.

[27] E. M. Ouhabaz, *Analysis of heat equations on domains*, London Math. Soc. Monographs, vol. 31, Princeton University Press 2004.

[28] M. Protter and H. Weinberger, *Maximum principles in differential equations*, Pentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1968.

[29] L. Saloff-Coste, *Aspects of Sobolev-type inequalities*, London Mathematical Society Lecture Note Series, 289, Cambridge University Press, Cambridge, 2002.

[30] D. W. Stroock, *Partial differential equations for probabilists*, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, 112. Cambridge University Press, Cambridge, 2008.

[31] M. van den Berg, *Gaussian bounds for the Dirichlet heat kernel*, J. Funct. Anal. 88 (1990), 267-278.

[32] M. van den Berg, *A Gaussian lower bound for the Dirichlet heat kernel*, Bull. London Math. Soc. 24 (1992), 475-477.

Institut Élie Cartan de Lorraine, UMR CNRS 7502, Université de Lorraine-Metz, F-57045 Metz cedex 1, France
E-mail address: `mourad.choulli@univ-lorraine.fr, laurent.kayser@univ-lorraine.fr`

Chapitre 3

A remark on the Gaussian lower bound for the Neumann heat kernel of the Laplace-Beltrami operator

Accepted in *Semigroup Forum*

A remark on the Gaussian lower bound for the Neumann heat kernel of the Laplace-Beltrami operator

Mourad Choulli and Laurent Kayser

Abstract. We adapt in the present note the perturbation method introduced in [3] to get a lower Gaussian bound for the Neumann heat kernel of the Laplace-Beltrami operator on an open subset of a compact Riemannian manifold.

Keywords. Neumann heat kernel, Laplace-Beltrami operator, Riemannian manifold.

Mathematics Subject Classification. 35K08

1. Introduction

The study of heat kernels is an important problem in the theory of parabolic PDE's. The properties of heat kernels give an efficient tool to answer to some central questions both in analysis and probability theory. One of the main questions is to know whether a heat kernel admits Gaussian bounds. An upper Gaussian bound is for instance an useful tool for getting L^p-L^q estimates, the analyticity of the corresponding semigroups in L^p for any finite $p \geq 1$ or bounded functional calculus, whereas one can get a strong maximum principle or a Harnack inequality from a lower Gaussian bound. We refer to the textbooks [5], [11] and [12] and references therein for more details on the subject.

In the preceding work [3], starting from the classical parametrix method, we constructed the Neumann heat kernel of a general parabolic operator as a perturbation of the fundamental solution of the same operator by a single-layer potential. From this construction, the two-sided Gaussian bounds for the fundamental solution and taking into account the smoothing effect in time of the single-layer potential, we succeeded in proving a lower Gaussian bound for the Neumann Green function. We adapt in the present note this method to establish a lower Gaussian bound for the Neumann heat kernel of Laplace-Beltrami operator.

In this text $\mathcal{M} = (\mathcal{M}, g)$ is a n-dimensional compact connected Riemannian manifold without boundary and Ω is a domain in $\mathcal{M}$ so that its boundary Σ is an $(n-1)$-dimensional Riemannian submanifold of M when it is equipped with the metric induced by g.

The Riemannian measure on $\mathcal{M}$ is denoted by dV while the density measure on Σ is denoted by dA. The geodesic ball of center $x \in \mathcal{M}$ and radius $r > 0$ is denoted by $B(x, r)$.

2. Neumann heat kernel

Let d be the Riemannian distance function and

$$\mathscr{E}(x,y,t) = (4\pi t)^{-n/2} e^{-\frac{d^2(x,y)}{4t}}.$$

In general $\mathscr{E}$ is not a heat kernel on $\mathcal{M}$. However the parametrix method by S. Minakshisundaram and Å.Pleijel shows that any compact Riemannian manifold has an almost euclidien heat kernel (e.g. [1, 2]). In particular, the heat kernel p of $\mathcal{M}$, satisfies

$$p(x,y,t) \sim \mathscr{E}(x,y,t),$$

locally uniformly in (x, y) as $t \downarrow 0$. We have a similar statement with the first order derivatives of p and $\mathscr{E}$.

This estimate is not true in general for distant x and y. Indeed the counter example in [10, Example 3.1, page 23] shows that if $\mathscr{M} = \mathbb{S}^2$, the 2-dimensional sphere equipped with the round metric, x is the north pole and y is the south pole, then

$$p(x,y,t) \sim ct^{-3/2} e^{-\frac{d^2(x,y)}{4t}},$$

for some constant $c > 0$.

From [5, Theorem 5.5.11 and Theorem 5.6.1, page 173], any complete Riemannian manifold with non negative Ricci curvature satisfies the following two-sided Gaussian bounds.

$$\mathscr{E}(x,y,t) \le p(x,y,t) \le \frac{c}{V(B(x,\sqrt{t}))} e^{-\kappa \frac{d^2(x,y)}{4t}}, \quad x, y \in \mathcal{M},\ t > 0.$$

Here $c > 0$ and $\kappa > 0$ are some constants.

Let $\Delta = \Delta_g$ be the Laplace-Beltrami operator associated to the metric g and denote by ν the outward normal vector field to Σ. Following the idea in [3], we construct the Green function of the Neumann problem

$$\begin{cases} (\partial_t - \Delta)u = 0 & \text{in } \Omega \times (0, +\infty), \\ \frac{\partial u}{\partial \nu} = 0, & \text{on } \Sigma \times (0, +\infty), \end{cases} \tag{2.1}$$

as a perturbation of the heat kernel p by a single-layer potential. As a first step, we seek the solution, in $C^{2,1}(\Omega\times(0,+\infty))\cap C^{0,1}(\overline{\Omega}\times[0,+\infty))$, of the following IBVP

$$\begin{cases} (\partial_t-\Delta)u=0 & \text{in } \Omega\times(0,+\infty),\\ \frac{\partial u}{\partial\nu}=0, & \text{on } \Sigma\times(0,+\infty),\\ u(\cdot,0)=\psi\in C_0^\infty(\Omega) & \end{cases} \tag{2.2}$$

of the form

$$u(x,t)=\int_0^t\int_\Sigma p(x,y,s)\varphi(y,t-s)dA(y)ds+\int_\Omega p(x,y,t)\psi(y)dV(y),$$
$$(x,t)\in\Omega\times(0,+\infty).$$

We obtain from the jump relation in [2, Theorem 2, page 161] that φ must be the solution of the following integral equation

$$\varphi(x,t)=-2\int_0^t\int_\Sigma \frac{\partial p}{\partial\nu_x}(x,y,s)\varphi(y,t-s)dA(y)ds$$
$$-2\int_\Omega \frac{\partial p}{\partial\nu_x}(x,y,t)\psi(y)dV(y),\;\; (x,t)\in\Sigma\times(0,+\infty).$$

This integral equation is solved by successive approximations. We get

$$\varphi(x,t)=\varphi_0(x,t)+\int_0^t\int_\Sigma r(x,y,s)\varphi_0(y,t-s)dA(y)ds,\;\; (x,t)\in\Sigma\times(0,+\infty).$$

Here

$$\varphi_0(x,t)=-2\int_\Omega \frac{\partial p}{\partial\nu_x}(x,y,t)\psi(y)dV(y),\;\; (x,t)\in\Sigma\times(0,+\infty),$$
$$r(x,y,t)=\sum_{j\geq 1} r^j(x,y,t),\;\; (x,t)\in\Sigma\times(0,+\infty),\; y\in\overline{\Omega},$$

with

$$r^1(x,y,t)=-2\frac{\partial p}{\partial\nu_x}(x,y,t),\;\; (x,t)\in\Sigma\times(0,+\infty),\; y\in\overline{\Omega},$$
$$r^{j+1}(x,y,t)=-2\int_0^t\int_\Sigma r^1(x,z,t-s)r^j(z,y,s)dA(z)ds,\;\; j\geq 1,$$
$$(x,t)\in\Sigma\times(0,+\infty),\; y\in\overline{\Omega}.$$

In other words

$$r(x,y,t)=-2\frac{\partial p}{\partial\nu_x}(x,y,t)-2\sum_{j\geq 1}\int_0^t\int_\Sigma r^j(x,z,s)\frac{\partial p}{\partial\nu_x}(z,y,t-s)dA(z)ds$$
$$(x,t)\in\Sigma\times(0,+\infty),\; y\in\overline{\Omega}.$$

The following two inequalities will be useful in the sequel. They are taken from [2].

For any $\mu>0$, there is a constant C_0 such that

$$\left|\frac{\partial p}{\partial\nu_x}(x,y,t)\right|\leq C_0t^{-\mu}d^{-n+2\mu}(x,y), \tag{2.3}$$

for any $x \in \Sigma$, $y \in \overline{\Omega}$ and $t \in (0, T]$.

There exists a constant C_1 such that, for any $\alpha, \beta \in (0, n-1)$,

$$\int_\Sigma d^{-\alpha}(x,z)d^{-\beta}(z,y)dA(z) \le C_1 \begin{cases} d^{n-1-(\alpha+\beta)}(x,y) & \text{if } \alpha+\beta > n-1, \\ 1 & \text{if } \alpha+\beta < n-1. \end{cases} \tag{2.4}$$

for all $x, y \in \overline{\Omega}$, $x \neq y$.

With the help of inequality (2.3), we prove similarly to [3, (3.6)]

$$\varphi(x,t) = \int_\Omega r(x,y,t)\psi(y)dV(y).$$

Then

$$u(x,t) = \int_\Omega q(x,y,t)\psi(y)dV(y),$$

where

$$q(x,y,t) = p(x,y,t) + \int_0^t \int_\Sigma p(x,z,s)r(z,y,t-s)dA(z)ds.$$

We call this function the Neumann heat kernel for the problem (2.1). We leave to the reader to verify that q satisfies the following reproducing property

$$q(x,y,t) = \int_\Omega q(x,z,t-s)q(z,y,s)dV(z),\ \ x,y \in \Omega,\ 0 < s < t,$$

and

$$\int_\Omega q(x,y,t)dV(y) = 1,\ \ x \in \Omega,\ t > 0.$$

3. Gaussian lower bound

We set $v(x,r) = V(B(x,r) \cap \Omega)$, $x \in \Omega$, and we consider the following three assumptions.

(VLB) (volume lower bound) There exist two constants C and r_0 so that

$$v(x,r) \ge Cr^n,\ \ x \in \Omega,\ 0 < r \le r_0.$$

(DP) (doubling property) There exist two constants $r_1 > 0$ and $C > 0$ so that

$$v(x,s) \le C\left(\frac{s}{r}\right)^n v(x,r),$$

for all $0 < r \le s \le r_1$ and $x \in \Omega$.

(CC) (chain condition) There exists a constant $C > 0$ such that for any $x, y \in \Omega$ and $k \in \mathbb{N}$, we find a sequence of points $(x_i)_{0 \le i \le k}$ so that $x_0 = x$, $x_k = y$ and

$$d(x_i, x_{i+1}) \le C\frac{d(x,y)}{k},\ \ 0 \le i \le k-1.$$

In the flat case, (VLC) and (DP) are true for any Lipschitz domain and (CC) holds for instance for a convex domain.

Let $\mathbb{S}^1$ be the unit sphere of $\mathbb{R}^2$ equipped with the round metric, that is the metric induced by the Euclidean metric on $\mathbb{R}^2$. Then any segment of length strictly less than π possesses the the three conditions (VLB), (DP) and (CC). Let $\mathbb{S}^2$ be the unit sphere of $\mathbb{R}^3$ equipped with the round metric. Then it is not hard to show that the sub-domain of $\mathbb{S}^2$ given by $z > \delta > 0$ satisfies also the three conditions (VLB), (DP) and (CC).

Conditions (DP) and (CC) are usual (see for instance [11, Theorem 7.29, page 248]), while condition (VLB) guarantees that the near diagonal lower bound (3.10) above holds.

We aim to sketch the proof of the following theorem

Theorem 3.1. *Fix $T > 0$ and assume that Ω satisfies (VLB), (DP) and (CC). Then*

$$q(x,y,t) \geq \frac{c}{v(x,\sqrt{t})} e^{-\frac{d^2(x,y)}{ct}}, \;\; x,y \in \Omega, \; 0 < t \leq T. \tag{3.5}$$

Sketch of the proof. Let $1/2 < \mu < n/2$. In light of (2.3) and (2.4), reasoning as in the proof of [3, Lemma 3.1], we obtain

$$|r(x,y,t)| \leq Ct^{-\mu} d^{-n+2\mu}(x,y),$$

for any $x \in \Sigma$, $y \in \overline{\Omega}$, $x \neq y$, $t \in (0,T]$.

Let

$$q_0(x,y,t) = \int_0^t \int_\Sigma p(x,z,s) r(z,y,t-s) dA(z) ds, \;\; x,y \in \Omega, \; t > 0,$$

and $0 < \alpha < 1/2$. We proceed as in the beginning of the proof of [3, Theorem 3.1] to get

$$|q_0(x,y,t)| \leq Ct^{-n/2+\alpha} \;\; x,y \in \Omega, \; t > 0. \tag{3.6}$$

Let $\epsilon := \mathrm{inj}(\mathcal{M})/4$, where $\mathrm{inj}(\mathcal{M})$ is the injectivity radius of $\mathcal{M}$. It follows from [2, formula (45), page 154] that there exists $\eta > 0$ so that

$$p(x,y,t) \geq \mathscr{E}(x,y,t), \;\; 0 < t \leq \eta, \; x,y \in \mathcal{M}, \; d(x,y) \leq \epsilon. \tag{3.7}$$

Hence,

$$p(x,y,t) \geq Ct^{-n/2}, \;\; 0 < t \leq \inf(\eta, \epsilon^2), \; x,y \in \mathcal{M}, \; d(x,y) \leq \sqrt{t}. \tag{3.8}$$

Now a combination of (3.6) and (3.8) leads

$$q(x,y,t) \geq p(x,y,t) - |q_0(x,y,y)| \geq Ct^{-n/2}(1 - ct^\alpha),$$
$$0 < t \leq \inf(\eta, \epsilon^2), \; x,y \in \Omega, \; d(x,y) \leq \sqrt{t}.$$

In consequence, there is $\delta > 0$ such that

$$q(x,y,t) \geq Ct^{-n/2}, \;\text{ if }\; 0 < t \leq \delta, \;\; x,y \in \Omega, \;\; d(x,y) \leq \sqrt{t}. \tag{3.9}$$

In light of the volume lower bound (VLB), this estimate entails

$$q(x,y,t) \geq \frac{C}{v(x,\sqrt{t})}, \;\text{ if }\; 0 < t \leq \widetilde{\delta}, \;\; x,y \in \Omega \;\; d(x,y) \leq \sqrt{t}, \tag{3.10}$$

for some constant $\widetilde{\delta}$.

We can now mimic the proof of [11, Theorem 7.29, page 248]. We get from (3.10) the following Gaussian lower bound

$$q(x,y,t) \geq \frac{c}{v(x,\sqrt{t})} e^{-\frac{d^2(x,y)}{ct}}, \;\; x,y \in \Omega,\; 0 < t \leq \widetilde{\delta}.$$

We finally use the argument as in [3, Theorem 3.1] to pass from $0 < t \leq \widetilde{\delta}$ to $0 < t \leq T$. □

It is worthwhile mentioning that one can establish a lower Gaussian bound by considering $\mathcal{N} = \overline{\Omega}$ itself as a compact Riemannian manifold with boundary. The structure of Riemannian manifold is the one inherited from $\mathcal{M}$. Obviously, (3.9) entails

$$q(x,y,t) \geq Ct^{-n/2}, \;\; 0 < t \leq \delta, \;\; x,y \in \mathcal{N}, \;\; d_{\mathcal{N}}(x,y) \leq \sqrt{t}. \tag{3.11}$$

Assume that the Ricci curvature of $\mathcal{N}$ is such that $Ric \geq (n-1)\kappa g$ for some $\kappa \in \mathbb{R}$. Then $\mathcal{N}$ satisfies the a doubling property (DP) when V is substituted by $V_{\mathcal{N}}$, the volume measure over $\mathcal{N}$. This fact is an immediate consequence of [7, formula in the bottom of page 7]. Let $v_{\mathcal{N}}(x,r) = V_{\mathcal{N}}(B(x,r))$, where $B(x,r)$ is the geodesic ball in $\mathcal{N}$ of center $x \in \mathcal{N}$ and radius r. In that case we can proceed as in the proof of Theorem 3.1 to derive the following estimate.

$$q(x,y,t) \geq \frac{c}{v_{\mathcal{N}}(x,\sqrt{t})} e^{-\frac{d_{\mathcal{N}}^2(x,y)}{ct}}, \;\; x,y \in \Omega,\; 0 < t \leq T.$$

This estimate should be compared to the one obtained by Li and Yau in [9, Theorem 4.2, page 184]. Specifically, they established a lower Gaussian bound for the heat kernel of a compact Riemannian manifold with convex boundary and having non negative Ricci curvature.

When $\mathcal{M}$ is any complete Riemannian manifold with finite diameter and having volume doubling property, and Ω is Lipschitz domain in $\mathcal{M}$ with volume doubling property, the Neumann heat kernel of Ω, denoted here by h, satisfies the following upper Gaussian bound.

$$h(x,y,t) \leq \frac{C}{v(x,\sqrt{t})v(y,\sqrt{t})} e^{-\frac{d^2(x,y)}{8t}}, \;\; x,y \in \Omega, t > 0,$$

where $C > 0$ is some constant.

This estimate was recently established by the authors and E. M. Ouhabaz [4].

4. Comments on geometric assumptions

Chain condition: A subset $\mathcal{C}$ of $\mathcal{M}$ is called strongly convex if for any $x,y \in \mathcal{C}$, there exists a unique minimal geodesic $\gamma : [0,1] \to \mathcal{M}$ joining x to y, so that $\gamma([0,1]) \subset \mathcal{C}$. According to a theorem due to Whitehead (see for instance [6, pages 161 and 162]), there exists a positive continuous function $\epsilon : \mathcal{M} \to (0,\infty]$, the convexity radius, such that any open ball $B(x,r) \subset B(x,\epsilon(x))$ is strongly convex. It is straightforward to check that if Ω is strongly convex then it has the chain condition.

Volume lower bound: Let $T_x\mathcal{M}$ be the tangent space at $x \in \mathcal{M}$, $\mathbb{S}_x \subset T_x\mathcal{M}$ the unit tangent sphere and $S\mathcal{M}$ the unit tangent bundle. Let Φ_t be the geodesic flow with phase space $S\mathcal{M}$. That is, for any $t \geq 0$,

$$\Phi_t : S\mathcal{M} \to S\mathcal{M} : (x,\xi) \in S\mathcal{M} \to \Phi_t(x,\xi) = (\gamma_{x,\xi}(t), \dot\gamma_{x,\xi}(t))\,.$$

Here $\gamma_{x,\xi} : [0,\infty) \to \mathcal{M}$ is the unit speed geodesic starting at x with tangent unit vector ξ and $\dot\gamma_{x,\xi}(t)$ is the unit tangent vector to $\gamma_{x,\xi}$ at $\gamma_{x,\xi}(t)$ in the forward t direction.

If $(x,\xi) \in S\mathcal{M}$, we denote by $r(x,\xi)$ the distance from x to the cutlocus in the direction of ξ:

$$r(x,\xi) = \inf\{t > 0;\ d(x,\Phi_t(x,\xi)) < t\}.$$

We fix $\delta \in (0,1]$ and $r > 0$. Following [13], a (δ,r)-cone at $x \in \mathcal{M}$ is the set of the form

$$\mathscr{C}(x,\omega_x,r) = \{y = \gamma_{x,\xi}(s);\ \xi \in \omega_x,\ 0 \leq s < r\},$$

where ω_x is a subset of $\mathbb{S}_x$ so that $r < r(x,\xi)$ for all $\xi \in \omega_x$ and $|\omega_x| \geq \delta$ (here $|\omega_x|$ is the volume of ω_x with respect to the normalized measure on the sphere $\mathbb{S}_x$).

A domain D which contains an (δ,r)-cone at x for any $x \in D$ is said to satisfy the interior (δ,r)-cone condition.

We observe that if $\mathcal{C}$ is a closed strongly convex subset of $\mathcal{M}$, then $\Omega = \mathcal{M} \setminus \mathcal{C}$ has the $(1/2,r)$-cone condition, for some r (this fact follows from the same argument to that in [13, Example 8.1, page 370]).

Let

$$s_\kappa(r) = \begin{cases} \left(\frac{\sin(\sqrt{\kappa}r}{\sqrt{\kappa}}\right)^{n-1} & \text{if } \kappa > 0,\\ r^{n-1} & \text{if } \kappa = 0,\\ \left(\frac{\sinh(\sqrt{-\kappa}r}{\sqrt{-\kappa}}\right)^{n-1} & \text{if } \kappa < 0. \end{cases}$$

We make the assumption that the sectional curvature of $\mathcal{M}$ is is bounded above by a constant κ, $\kappa \in \mathbb{R}$, and Ω satisfies the interior (δ,r)-cone condition. Let $J(x,\xi,t)$ be the density of the volume element in geodesic coordinates around x:

$$dV(y) = J(x,\xi,t)d_{\mathbb{S}_x}dt,\ \ y = \gamma_{x,\xi}(t),\ t < r(x,\xi).$$

By an extension of Günther's comparison theorem (see for instance [8]), J satisfies the following uniform lower bound

$$J(x,\xi,t) \geq s_\kappa(t).$$

Consequently, shrinking r_0 if necessary, we have

$$v(x,r) \geq V(\mathscr{C}(x,\omega_x,r)) \geq c_0 r^n,\ \ x \in \Omega,\ 0 < r \leq r_0, \tag{4.12}$$

which means that v satisfy the volume lower bound (VLB).

Additionally, if $\mathcal{M}$ satisfies the following volume growth condition

$$V(x,r) \leq c_1 r^n,\ \ 0 < r \leq r_0, \tag{4.13}$$

for some constants c_1 and r_1 then v has the doubling property (DP).

As a consequence of Theorem 3.1, we have

Corollary 4.1. *Assume that the sectional curvature of* $\mathcal{M}$ *is bounded from above, the volume growth condition* (4.13) *is fulfilled and* Ω *is strongly convex and satisfies the interior* (δ, r)*-cone condition. Then*

$$q(x,y,t) \geq c\mathscr{E}(x,y,ct), \;\; x,y \in \Omega, \; 0 < t \leq T. \tag{4.14}$$

References

[1] M. Berger P. Gauduchon and E. Mazet, Le spectre d'une variété Riemannienne, Lect. Motes. Math. 194, Springer, Berlin, 1974.

[2] I. Chavel, Eigenvalues in Riemannian geometry, Academic Press, Orlando, 1984.

[3] M. Choulli and L. Kayser, Gaussian lower bound for the Neumann Green function of a general parabolic operator, *Positivity*, DOI 10.1007/s11117-014-0319-z.

[4] M. Choulli, L. Kayser and E. M. Ouhabaz, Comments on Gaussian upper bound for Neumann heat kernels, to appear in Bull. Aust. Math. Soc..

[5] E. B. Davies, Heat kernels and spectral theory Cambridge Tracts in Math. 92, Cambridge University Press, London 1989.

[6] D. Gromoll, W. Klingbenberg and W. Meyer, Riemannsche Geometrie im Grossen, Lecture Notes in Mathematics 55, Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1968.

[7] E. Hebey, Sobolev spaces on Riemannian manifolds, Springer, Berlin, 1996.

[8] B. R. Kloeckner and G. Kuperberg, A refinement of Günther's candle inequality, arXiv:1204.3943.

[9] P. Li and S.T. Yau, On the parabolic kernel of the Schrödinger operator, *Acta Math.* **156** (1986), 153-201.

[10] S. A. Molchanov, Diffusion processes and Riemannian geometry, Russian Math. Surveys **30** (1) (1975), 1-63.

[11] E. M. Ouhabaz, Analysis of heat equations on domains, London Math. Soc. Monographs, vol. 31, Princeton University Press 2004.

[12] D. W. Stroock, Partial differential equations for probabilists, Cambridge Studies in Advanced Mathematics, 112. Cambridge University Press, Cambridge, 2008.

[13] L. Saloff-Coste, Pseudo-Poincaré inequalities and applications to Sobolev inequalities, Around the research of Vladimir Maz'ya. I, 349-372, Int. Math. Ser. (N. Y.), 11, Springer, New York, 2010.

Mourad Choulli
Institut Élie Cartan de Lorraine, UMR CNRS 7502, Université de Lorraine, Boulevard des Aiguillettes, BP 70239, 54506 Vandoeuvre les Nancy cedex - Ile du Saulcy, 57045 Metz cedex 01, France
e-mail: `mourad.choulli@univ-lorraine.fr`

Laurent Kayser
Institut Élie Cartan de Lorraine, UMR CNRS 7502, Université de Lorraine, Boulevard des Aiguillettes, BP 70239, 54506 Vandoeuvre les Nancy cedex - Ile du Saulcy, 57045 Metz cedex 01, France
e-mail: `laurent.kayser@univ-lorraine.fr`

Chapitre 4

Observations on Gaussian upper bounds for Neumann heat kernels

Accepted in *Bulletin of the Australian Mathematical Society*

OBSERVATIONS ON GAUSSIAN UPPER BOUNDS FOR NEUMANN HEAT KERNELS

Mourad Choulli, Laurent Kayser

Institut Élie Cartan de Lorraine, UMR CNRS 7502, Université de Lorraine
Boulevard des Aiguillettes, BP 70239, 54506 Vandoeuvre les Nancy cedex -
Ile du Saulcy, 57045 Metz cedex 01, France

El Maati Ouhabaz

Institut Mathématiques de Bordeaux, UMR CNRS 5251
Université de Bordeaux, 351 Cours de la Libération
F-33405 Talence, France

Abstract. Given a domain Ω of a complete Riemannian manifold $\mathcal{M}$ and define $\mathcal{A}$ to be the Laplacian with Neumann boundary condition on Ω. We prove that, under appropriate conditions, the corresponding heat kernel satisfies the Gaussian upper bound

$$h(t,x,y) \le \frac{C}{\left[V_\Omega(x,\sqrt{t})V_\Omega(y,\sqrt{t})\right]^{1/2}}\left(1+\frac{d^2(x,y)}{4t}\right)^{\delta} e^{-\frac{d^2(x,y)}{4t}},\ \ t>0,\ x,y\in\Omega.$$

Here d is the geodesic distance on $\mathcal{M}$, $V_\Omega(x,r)$ is the Riemannian volume of $B(x,r)\cap\Omega$, where $B(x,r)$ is the geodesic ball of center x and radius r, and δ is a constant related to the doubling property of Ω.

As a consequence we obtain analyticity of the semigroup $e^{-t\mathcal{A}}$ on $L^p(\Omega)$ for all $p\in[1,\infty)$ as well as a spectral multiplier result.

1. Introduction and main results

This short note is devoted to the Gaussian upper bound for the heat kernel of the Neumann Laplacian. Let us start with the Euclidean setting in which Ω is a bounded Lipschitz domain of $\mathbb{R}^n$. Let Δ_N be the Neumann Laplacian. It is well known that the corresponding heat kernel $h(t,x,y)$ satisfies

$$0\le h(t,x,y)\le Ct^{-n/2}e^te^{-c\frac{|x-y|^2}{t}},\ \ t>0,\ x,y\in\Omega. \tag{1}$$

One can replace the extra term e^t by $(1+t)^{n/2}$ but the decay $h(t,x,y)\le Ct^{-n/2}$ cannot hold for large t since $e^{t\Delta_N}1=1$. We refer to the monographs [5] or [17] for more details.

In applications, for example when applying the Gaussian bound to obtain spectral multiplier results one can apply (1) to $-\Delta_N+I$ (or ϵI for any $\epsilon>0$) and not to $-\Delta_N$. It is annoying to add the identity operator especially it is not clear how the functional calculus for $-\Delta_N$ can be related to that of $-\Delta_N+I$. The same problem occurs for analyticity of the semigroup $e^{t\Delta_N}$ on $L^p(\Omega)$ for $p\in[1,\infty)$. One obtains from (1) analyticity of the semigroup but not a bounded analytic semigroup. This boundedness (on sectors of the right half plane) is important in order to obtain appropriate estimates for the resolvent or for the time derivatives of the solution to the corresponding evolution equation on L^p. In this note we will show in an elementary way how one can resolve this question. The idea is that (1) can be improved into a Gaussian upper bound of the type

$$h(t,x,y)\le\frac{C}{\left[V_\Omega(x,\sqrt{t})V_\Omega(y,\sqrt{t})\right]^{1/2}}e^{-c\frac{|x-y|^2}{t}},\ \ t>0,\ x,y\in\Omega, \tag{2}$$

1991 *Mathematics Subject Classification.* Primary: 35K08.

Key words and phrases. Heat kernels, Gaussian bounds, Neumann Laplacian, Riemannian manifolds.

The research of E.M.O. was partially supported by the ANR project HAB, ANR-12-BS01-0013-02.

where $V_\Omega(x,r)$ denotes the volume of $\Omega\cap B(x,r)$ and $B(x,r)$ is the open ball of center x and radius r. There is no extra factor in (2) and one can use this estimate in various applications of Gaussian bounds instead of (1).

We shall state most of the results for Lipschitz domains of general Riemannian manifolds.

Let $(\mathcal{M},g)$ be a complete Riemannian manifold of dimension n without boundary. Let Ω be a subdomain of $\mathcal{M}$ with Lipschitz boundary Γ. That is, Γ can be described in an appropriate local coordinates by means of graphs of Lipschitz functions. Specifically, for any $p\in\Gamma$, there exist a local chart (U,ψ), $\psi:U\to\mathbb{R}^n$ with $\psi(p)=0$, a Lipschitz function $\lambda:\mathbb{R}^{n-1}\to\mathbb{R}$ with $\lambda(0)=0$ and $\epsilon>0$ such that

$$\psi(U\cap\Omega)=\{(x',\lambda(x')+t);\ 0<t<\epsilon,\ x'\in\mathbb{R}^{n-1},\ |x'|<\epsilon\},$$
$$\psi(U\cap\Gamma)=\{(x',\lambda(x'));\ x'\in\mathbb{R}^{n-1},\ |x'|<\epsilon\}.$$

We use in this text Einstein summation convention for repeated indices. We recall that, in local coordinates $x=(x_1,\ldots,x_n)$,

$$g(x)=g_{ij}dx_i\otimes dx_j.$$

If $f\in C^\infty(\mathcal{M})$, the gradient of f is the vector field given by

$$\nabla f=g^{ij}\frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial}{\partial x_j}$$

and the Laplace-Beltrami operator is the operator acting as follows

$$\Delta f=|g|^{-1/2}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(|g|^{1/2}g^{ij}\frac{\partial f}{\partial x_j}\right),$$

where (g^{ij}) is the inverse of the metric g and $|g|$ is the determinant of g.

Let μ be the Riemannian measure induced by the metric g. That is

$$d\mu=|g|^{1/2}dx_1\ldots dx_n.$$

We set $L^2(\Omega)=L^2(\Omega,d\mu)$. Let $H^1(\Omega)$ be the closure of $C_0^\infty(\overline{\Omega})$ with respect to the norm

$$\|f\|_{H^1(\Omega)}=\left(\int_\Omega f(x)^2d\mu(x)+\int_\Omega|\nabla f(x)|^2d\mu(x)\right)^{1/2}.$$

Here

$$|\nabla f|^2=\langle\nabla f,\nabla f\rangle,$$

where

$$\langle\nabla f,\nabla g\rangle=g^{ij}\frac{\partial f}{\partial x_i}\frac{\partial g}{\partial x_j}.$$

We consider on $L^2(\Omega)\times L^2(\Omega)$ the unbounded bilinear form

$$\mathfrak{a}(f,g)=\int_\Omega\langle\nabla f,\nabla g\rangle d\mu(x)$$

with domain $D(\mathfrak{a})=H^1(\Omega)$.

Since Γ is Lipschitz, the unit conormal $\nu\in T^*\mathcal{M}$ is defined a.e. with respect to the surface measure $d\sigma$. Let $\partial_\nu f=\langle\nabla f,\nu\rangle=g^{ij}\nu_i\frac{\partial f}{\partial x_j}$ and

$$H_\Delta(\Omega)=\{f\in L^2(\Omega);\ \Delta f\in L^2(\Omega)\}.$$

We recall the Green's formula

$$\int_\Omega\langle\nabla f,\nabla g\rangle d\mu=-\int_\Omega\Delta fgd\mu+\int_\Gamma\partial_\nu fgd\sigma,\ \ f\in C_0^\infty(\overline{\Omega}),\ g\in H^1(\Omega).$$

In light of this formula, we define $\partial_\nu f,\ f \in H_\Delta(\Omega)$, as an element of $H^{-1/2}(\Gamma)$, the dual space of $H^{1/2}(\Gamma)$, by the following formula

$$(\partial_\nu f, g)_{1/2} := \int_\Omega \Delta f g d\mu + \int_\Omega \langle \nabla f, \nabla g\rangle d\mu, \ \ g \in H^1(\Omega).$$

Here $(\cdot,\cdot)_{1/2}$ is the duality pairing between $H^{1/2}(\Gamma)$ and $H^{-1/2}(\Gamma)$.

We define the operator $\mathcal{A}u = -\Delta u$ with domain

$$D(\mathcal{A}) = \{u \in H_\Delta(\Omega);\ \partial_\nu u = 0\}.$$

Then it is straightforward to see that $\mathcal{A}$ is the operator associated to the form $\mathfrak{a}$.

Let d be the geodesic distance and $B(x,r)$ be the geodesic ball with respect to d of center $x \in \mathcal{M}$ and radius $r > 0$, and set $V(x,r) = \mu(B(x,r))$.

We assume in what follows that $\mathcal{M}$ satisfies the volume doubling (abbreviated to VD in the sequel) property: there exists $C > 0$ so that

$$V(x,2r) \le CV(x,r), \ \ x \in \mathcal{M},\ r > 0.$$

We shall assume that the heat kernel $p(t,x,y)$ of the Laplacian on $\mathcal{M}$ satisfies the Gaussian upper bound

$$p(t,x,y) \le \frac{C}{\left[V(x,\sqrt{t})V(y,\sqrt{t})\right]^{1/2}} e^{-c\frac{d^2(x,y)}{t}}, \ \ t > 0,\ x,y \in \mathcal{M} \tag{3}$$

in which C and c are positive constants.

A typical example of a manifold which satisfies both properties is a manifold with non negative Ricci curvature. The volume doubling property is then an immediate consequence of Gromov-Bishop theorem. The Gaussian upper bound can be found in [14].

We define V_Ω by

$$V_\Omega(x,r) = \mu\left(B(x,r) \cap \Omega\right), \ \ r > 0,\ x \in \Omega.$$

The main assumption on Ω is the following variant of the VD property: there exist two constants $K > 0$ and $\delta > 0$ so that

$$V_\Omega(x,s) \le K\left(\frac{s}{r}\right)^\delta V_\Omega(x,r), \ \ 0 < r \le s,\ x \in \Omega. \tag{4}$$

Note that this doubling property holds for all bounded Lipschitz domains of $\mathbb{R}^n$ (with $\delta = n$). We shall discuss this in Section 3.

Most of the results we will refer to are valid for metric measure space with Borel measure. In our case this metric measure space is nothing else but (Ω, d, μ). Here, we keep the notations d and μ for the distance and measure induced on Ω by d on $\mathcal{M}$ and μ on $\mathcal{M}$.

Now we state our main results which we formulate in following theorem and the subsequent corollaries.

Theorem 1.1. *(1) $-\mathcal{A}$ generates a symmetric Markov semigroup $e^{-t\mathcal{A}}$ with kernel $h \in C^\infty((0,\infty)\times\Omega\times\Omega)$.*
(2) Suppose that $\mathcal{M}$ satisfies VD and (3) and Ω satisfies the VD property (4) and diam$(\Omega) < \infty$. Then h has the following Gaussian upper bound

$$h(t,x,y) \le \frac{C}{\left[V_\Omega(x,\sqrt{t})V_\Omega(y,\sqrt{t})\right]^{1/2}}\left(1 + \frac{d^2(x,y)}{4t}\right)^\delta e^{-\frac{d^2(x,y)}{4t}}, \ \ t > 0,\ x,y \in \Omega.$$

Since $\rho \in [0,\infty) \to (1+\rho)^\delta e^{-\rho/2}$ is bounded function, an immediate consequence of Theorem 1.1 is

Corollary 1. *Suppose that $\mathcal{M}$ satisfies VD and (3) and Ω satisfies the VD property (4) and diam$(\Omega) < \infty$. Then*

$$h(t,x,y) \le \frac{C}{\left[V_\Omega(x,\sqrt{t})V_\Omega(y,\sqrt{t})\right]^{1/2}} e^{-\frac{d^2(x,y)}{8t}}, \ \ t > 0,\ x,y \in \Omega.$$

We note that for unbounded domains, Gaussian upper bounds for the Neumann heat kernel are proved in [9].

Theorem 1.1 (2) or its corollary has several consequences.

Corollary 2. *Suppose that $\mathcal{M}$ satisfies VD and (3) and Ω satisfies the VD property (4) and diam$(\Omega) < \infty$. Then*
(1) the semigroup $e^{-t\mathcal{A}}$ extends to a bounded holomorphic semigroup on $\mathbb{C}^+$ on $L^p(\Omega, \mu)$ for all $p \in [1, \infty)$,
(2) the spectrum of $\mathcal{A}$, viewed as an operator acting on $L^p(\Omega)$, $p \in [1, \infty)$, is independent of p.

Assertion (1) is a consequence of Corollary 1 combined with [17, Corollary 7.5, page 202]. It was originally proved in [16]. Assertion (2) follows from a result in [6] which asserts that a Gaussian upper bound implies p-independence of the spectrum. See also [17, Theorem 7.10, page 206] for the general form needed here.

Let (E_λ) be the spectral resolution of the non negative self-adjoint operator $\mathcal{A}$. We recall that for any bounded Borel function $f : [0, \infty) \to \mathbb{C}$, the operator $f(\mathcal{A})$ is defined by

$$f(\mathcal{A}) = \int_0^\infty f(\lambda) dE_\lambda.$$

An operator T on the measure space (Ω, μ) is said of weak type $(1, 1)$ if

$$\|T\|_{L^1(\Omega)\to L^1_w(\Omega)} := \sup\{\lambda\mu(\{x \in \Omega;\ |T\varphi(x)| > \lambda\});\ \lambda > 0,\ \|\varphi\|_{L^1(\Omega)} = 1\} < \infty.$$

In light of [7, Theorem 1.3, page 450 and Remark 1, page 451], another consequence of Corollary 1 is

Corollary 3. *Suppose that $\mathcal{M}$ satisfies VD and (3) and Ω satisfies the VD property (4) and diam$(\Omega) < \infty$. Let $s > \delta/2$, where δ is as in (4), $\varphi \in C_0^\infty((0, \infty))$ non identically equal to zero and $f : [0, \infty) \to \mathbb{C}$ a Borel function satisfying*

$$\sup_{t>0} \|\varphi(\cdot)f(t\cdot)\|_{W^{s,\infty}} < \infty.$$

Then $f(\mathcal{A})$ is of weak type $(1, 1)$ and bounded on $L^p(\Omega)$ for any $p \in (1, \infty)$. Additionally,

$$\|f(\mathcal{A})\|_{L^1(\Omega)\to L^1_w(\Omega)} \le C_s \left(\sup_{t>0} \|\varphi(\cdot)f(t\cdot)\|_{W^{s,\infty}} + |f(0)| \right).$$

A particular case of this corollary concerns the imaginary powers of $\mathcal{A}$. Precisely, $\mathcal{A}^{ir}$, $r \in \mathbb{R}$, extends to a bounded operator on $L^p(\Omega)$, $p \in (1, \infty)$, and, for any $\epsilon > 0$, there is a constant $C_\epsilon > 0$ so that

$$\|\mathcal{A}^{ir}\|_{\mathscr{B}(L^p(\Omega))} \le C_\epsilon (1 + |r|)^{\delta|1/2-1/p|+\epsilon}. \tag{5}$$

Indeed, an application of the previous corollary with $f(\lambda) = \lambda^{ir}$ shows that

$$\|\mathcal{A}^{ir}\|_{L^1(\Omega)\to L^1_w(\Omega)} \le C_\epsilon (1 + |r|)^{\delta/2+\epsilon}.$$

On the other hand, the standard functional calculus for self-adjoint operators gives

$$\|\mathcal{A}^{ir}\|_{\mathscr{B}(L^2(\Omega))} \le 1.$$

Therefore, (5) follows by interpolation. We refer to [17, Corollary 7.24, page 239] for more details.

2. Proof of the main theorem

Proof of Theorem 1.1. (1) We first recall that $-\mathcal{A}$ generates on $L^2(\Omega)$ an analytic semigroup $e^{-t\mathcal{A}}$. Note that

$$e^{-t\mathcal{A}} = \int_0^{+\infty} e^{-t\lambda} dE_\lambda,\quad t \ge 0.$$

Proposition 1. *(a) $e^{-t\mathcal{A}}$ is positivity preserving.*
(b) $e^{-t\mathcal{A}}$ is a contraction on $L^p(\Omega) = L^p(\Omega, d\mu)$ for all $1 \le p \le \infty$ and $t \ge 0$.

Proof. (a) We recall that if $u \in H^1(\Omega)$, then $u^+, u^- \in H^1(\Omega)$ and $\nabla|u| = \nabla u^+ + \nabla u^-$. Hence

$$\mathfrak{a}(|u|,|u|) = \mathfrak{a}(u,u), \quad u \in H^1(\Omega).$$

In light of [5, Theorem 1.3.2, page 12], we deduce that $e^{-t\mathcal{A}}$ is positivity preserving.

(b) If $0 \le u \in H^1(\Omega)$, then one can check in a straightforward manner that $u \wedge 1 = \min(u,1) \in H^1(\Omega)$ and

$$\nabla(u\wedge 1) = \begin{cases} \nabla u & \text{in } [u>1], \\ 0 & \text{in } [u \le 1]. \end{cases}$$

Therefore $e^{-t\mathcal{A}}$ is a contraction semigroup on $L^p(\Omega)$ for all $1 \le p \le \infty$ by [5, Theorem 1.3.3, page 14]. □

This proposition says that $e^{-t\mathcal{A}}$ is a symmetric Markov semigroup.

We have for any integer k,

$$\mathcal{A}^k e^{-t\mathcal{A}} = \int_0^{+\infty} \lambda^k e^{-t\lambda} dE_\lambda. \tag{6}$$

Therefore, $e^{-t\mathcal{A}}f \in D(\mathcal{A})$, for all $f \in L^2(\Omega)$ and $t>0$.

On the other hand, we get from the usual interior elliptic regularity

$$\bigcap_{k\in\mathbb{N}} D(\mathcal{A}^k) \subset C^\infty(\Omega).$$

Hence, $x \to e^{-t\mathcal{A}}f(x)$ belongs to $C^\infty(\Omega)$ for any fixed $t>0$. But, $t \to e^{-t\mathcal{A}}f$ is analytic on $(0,\infty)$ with values in the Hilbert space $D(\mathcal{A}^k)$. Consequently, $(t,x) \to e^{-t\mathcal{A}}f(x)$ is in $C^\infty((0,\infty)\times\Omega)$.

From now on, the scalar product of $L^2(\Omega)$ will be denoted by $(\cdot,\cdot)_{2,\Omega}$ and the norm of $L^p(\Omega)$, $1 \le p \le \infty$, by $\|\cdot\|_{p,\Omega}$. The norm of $L^p(\mathcal{M})$ is simply denoted by $\|\cdot\|_p$, $1 \le p \le \infty$.

We fix $t>0$. Using that $\lambda \to \lambda^k e^{-t\lambda}$ attains its maximum value at $\lambda = k/t$, we obtain from (6) for $f \in L^2(\Omega)$

$$\begin{aligned} \|\mathcal{A}^k e^{-t\mathcal{A}} f\|_{2,\Omega}^2 &= \int_0^\infty [\lambda^k e^{-\lambda t}]^2 d\|E_\lambda f\|_{2,\Omega}^2 \\ &\le \sup_{\lambda>0} [\lambda^k e^{-\lambda t}]^2 \int_0^\infty d\|E_\lambda f\|_{2,\Omega}^2 \\ &\le \left(\frac{k}{t}\right)^{2k} e^{-2k}\|f\|_{2,\Omega}^2. \end{aligned} \tag{7}$$

Again by the interior elliptic regularity, $D(\mathcal{A}^k)$ is continuously embedded in $C(\Omega)$ when k is sufficiently large. This and (7) entails: for any $\omega \Subset \Omega$, there exists $C = C(\Omega,\omega,k)$ so that

$$\sup_{\overline{\omega}} |e^{-t\mathcal{A}}f| \le \frac{C^2}{t^k}\|f\|_{2,\Omega}. \tag{8}$$

In particular, for any fixed $x \in \Omega$ and $t>0$, the (linear) mapping $f \to e^{-t\mathcal{A}}f(x)$ is continuous. We can then apply the Riesz representation theorem to deduce that there exists $\ell(t,x) \in L^2(\Omega)$ so that

$$e^{-t\mathcal{A}}f(x) = (\ell(t,x), f)_{2,\Omega}, \quad x \in \Omega, \ t>0.$$

Therefore, $(t,x) \to \ell(t,x) \in L^2(\Omega)$ is weakly C^∞ on $(0,\infty)\times\Omega$ and hence norm C^∞ by [4, Section 1.5].

Let $h(t,x,y) = (\ell(t/2,x), \ell(t/2,y))$. Then $h \in C^\infty((0,\infty)\times\Omega\times\Omega)$ and

$$\left(e^{-t\mathcal{A}}f, g\right)_{2,\Omega} = \left(e^{-\frac{t}{2}\mathcal{A}}f, e^{-\frac{t}{2}\mathcal{A}}g\right)_{2,\Omega} = \int_\Omega\int_\Omega h(t,x,y)f(x)g(y)d\mu(x)d\mu(y), \quad f,g \in C_0^\infty(\Omega).$$

By the density of $C_0^\infty(\Omega)$ in $L^2(\Omega)$, we derive from the last identity that

$$e^{-t\mathcal{A}}f(x) = \int_\Omega h(t,x,y)f(x)d\mu(x), \quad t>0, \ x\in\Omega, \ f \in L^2(\Omega).$$

(2) We start with the following proposition.

Proposition 2. *$e^{-t\mathcal{A}}$ satisfies the Davies-Caffney (abbreviated to DG in the sequel) property. That is, for any $t>0$, U_1, U_2 open subsets of Ω, $f\in L^2(U_1,d\mu)$ and $g\in L^2(U_2,d\mu)$,*

$$\left|(e^{-t\mathcal{A}}f,g)_{2,\Omega}\right|\le e^{-\frac{r^2}{4t}}\|f\|_{2,\Omega}\|g\|_{2,\Omega}.$$

Here

$$r=\mathrm{dist}(U_1,U_2)=\inf_{x\in U_1,\ y\in U_2}d(x,y).$$

Proof. We omit the proof which is similar to that of [3, Theorem 3.3, page 515]. □

We now observe that Ω has the 1-extension property (see for instance [15, Theorem C]). In other words, there exists $\mathcal{E}\in\mathscr{B}(H^1(\Omega),H^1(\mathcal{M}))$ satisfying $(\mathcal{E}u)_{|\Omega}=u$, $u\in H^1(\Omega)$.

On the other hand, since $\mathcal{M}$ has the volume doubling property and the Gaussian bound (3), it follows from [1, Theorem 1.2.1] that the following Gagliado-Nirenberg type inequality holds: for $2<q\le+\infty$, there exists a constant $C>0$ so that

$$\|fV^{\frac12-\frac1q}(\cdot,r)\|_q\le C\left(\|f\|_2+r\||\nabla f|\|_2^2\right),\quad r>0,\ f\in C_0^\infty(\mathcal{M}). \tag{9}$$

In light of (9) and using that $V_\Omega(\cdot,r)\le V(\cdot,r)$ in Ω, we obtain for $r>0$, $f\in H^1(\Omega)$ and fixed $2<q\le\infty$,

$$\begin{aligned}\|fV_\Omega^{\frac12-\frac1q}(\cdot,r)\|_{q,\Omega}&\le\|fV^{\frac12-\frac1q}(\cdot,r)\|_{q,\Omega}\\&\le\|(\mathcal{E}f)V^{1/2-1/q}\|_q\\&\le C\left(\|\mathcal{E}f\|_2+r\||\nabla(\mathcal{E}f)|\|_2\right)\\&\le C\|\mathcal{E}\|\left((1+r)\|f\|_{2,\Omega}+r\||\nabla f|\|_{2,\Omega}\right).\end{aligned}$$

Here $\|\mathcal{E}\|$ is the norm of $\mathcal{E}$ in $\mathscr{B}(H^1(\Omega),H^1(\mathcal{M}))$. Hence

$$\|fV_\Omega(\cdot,r)^{\frac12-\frac1q}\|_{q,\Omega}\le C\left(\|f\|_{2,\Omega}+r\||\nabla f|\|_{2,\Omega}\right),\quad r>0,\ f\in H^1(\Omega), \tag{10}$$

where we used the fact that $V_\Omega(\cdot,r)=V_\Omega(\cdot,r_0)=\mu(\Omega)$, for all $r\ge r_0=\mathrm{diam}\,(\Omega)$.

We then apply [1, Theorem 1.2.1] to derive that h possesses a diagonal upper bound. In other words, there exists a constant $C>0$ so that

$$h(t,x,y)\le\frac{C}{\left[V_\Omega(x,\sqrt t)V_\Omega(x,\sqrt t)\right]^{1/2}},\quad t>0,\ x,y\in\Omega. \tag{11}$$

Since $e^{-t\mathcal{A}}$ has the DG property by Proposition 2 we get, from [3, Corollary 5.4, page 524],

$$h(t,x,y)\le\frac{eC}{\left[V_\Omega(x,\sqrt t)V_\Omega(y,\sqrt t)\right]^{1/2}}\left(1+\frac{d^2(x,y)}{4t}\right)^\delta e^{-\frac{d^2(x,y)}{4t}},\quad t>0,\ x,y\in\Omega.$$

The proof is then complete. □

3. Domains with volume doubling property

Flat case. It is known that any bounded Lipschitz domain of $\mathbb{R}^n$ satisfies the volume doubling property. We discuss this again here. We consider $\mathbb{R}^n$ equipped with its euclidean metric $g=(\delta_{ij})$. Let

$$\mathscr{C}(y,\xi,\epsilon)=\{z\in\mathbb{R}^n;\ (z-y)\cdot\xi\ge(\cos\epsilon)|z-y|,\ 0<|y-z|<\epsilon\},$$

where $y\in\mathbb{R}^n$, $\xi\in\mathbb{S}^{n-1}$ and $0<\epsilon$. That is, $C(y,\xi,\epsilon)$ is the cone, of dimension ϵ, with vertex y, aperture ϵ and directed by ξ.

We say that Ω has the ϵ-cone property if

$$\text{for any } x\in\Gamma,\ \text{there exists } \xi_x\in\mathbb{S}^{n-1} \text{ so that, for all } y\in\overline{\Omega}\cap B(x,\epsilon),\ \mathscr{C}(y,\xi_x,\epsilon)\subset\Omega.$$

Let Ω be a bounded Lipschitz domain of $\mathbb{R}^n$. Then, by [12, Theorem 2.4.7, page 53], Ω has the ϵ-cone property, for some $\epsilon > 0$. This implies that there exist $c_0 > 0$ and $\rho > 0$ so that

$$V_\Omega(x,r) = |B(x,r)\cap\Omega| \geq c_0 r^n,\;\; x\in\Omega,\; 0<r\leq\rho. \tag{12}$$

An immediate consequence is that Ω (equipped with its euclidean metric) satisfies the volume doubling property. Indeed, let $r_0 = \mathrm{diam}\,(\Omega)$ and $0<r\leq s$. Then (12) entails

$$V_\Omega(x,s) \leq c_1 s^n = c_1\left(\frac{s}{r}\right)^n r^n \leq \frac{c_1}{c_0}\left(\frac{s}{r}\right)^n V_\Omega(x,r),\;\; 0<r\leq\rho, \tag{13}$$

where $c_1 = |B(0,1)|$.

Also, when $\rho < r_0$,

$$V_\Omega(x,s) \leq \frac{c_1}{c_0}\left(\frac{s}{\rho}\right)^n V_\Omega(x,\rho) \leq \frac{c_1}{c_0}\left(\frac{r_0}{\rho}\right)^n \left(\frac{s}{r}\right)^n V_\Omega(x,r),\;\; \rho<r\leq r_0. \tag{14}$$

Finally, it is obvious that

$$V_\Omega(x,s) = |\Omega| = V_\Omega(x,r_0) \leq \left(\frac{s}{r}\right)^n V_\Omega(x,r),\;\; r>r_0. \tag{15}$$

Estimates (13), (14) and (15) show the volume doubling property.

Manifold with sectional curvature bounded from above. Let $T_x\mathcal{M}$ be the tangent space at $x\in\mathcal{M}$, $\mathbb{S}_x\subset T_x\mathcal{M}$ the unit tangent sphere and $S\mathcal{M}$ the unit tangent bundle. Let Φ_t be the geodesic flow with phase space $S\mathcal{M}$. That is, for any $t\geq 0$,

$$\Phi_t : S\mathcal{M}\to S\mathcal{M} : (x,\xi)\in S\mathcal{M}\to \Phi_t(x,\xi) = (\gamma_{x,\xi}(t),\dot\gamma_{x,\xi}(t))\,.$$

Here $\gamma_{x,\xi} : [0,\infty)\to\mathcal{M}$ is the unit speed geodesic starting at x with tangent unit vector ξ and $\dot\gamma_{x,\xi}(t)$ is the unit tangent vector to $\gamma_{x,\xi}$ at $\gamma_{x,\xi}(t)$ in the forward t direction.

If $(x,\xi)\in S\mathcal{M}$, we denote by $r(x,\xi)$ the distance from x to the cutlocus in the direction of ξ:

$$r(x,\xi) = \inf\{t>0;\; d(x,\Phi_t(x,\xi))<t\}.$$

We fix $\delta\in(0,1]$ and $r>0$. Following [18], a (δ,r)-cone at $x\in\mathcal{M}$ is the set of the form

$$\mathscr{C}(x,\omega_x,r) = \{y=\gamma_{x,\xi}(s);\; \xi\in\omega_x,\; 0\leq s<r\},$$

where ω_x is a subset of $\mathbb{S}_x$ so that $r<r(x,\xi)$ for all $\xi\in\omega_x$ and $|\omega_x|\geq\delta$ (here $|\omega_x|$ is the volume of ω_x with respect to the normalized measure on the sphere $\mathbb{S}_x$).

A domain D which contains a (δ,r)-cone at x for any $x\in D$ is said to satisfy the interior (δ,r)-cone condition.

Let

$$s_\kappa(r) = \begin{cases} \left(\frac{\sin(\sqrt{\kappa}r}{\sqrt{\kappa}}\right)^{n-1} & \text{if } \kappa>0,\\ r^{n-1} & \text{if } \kappa=0,\\ \left(\frac{\sinh(\sqrt{-\kappa}r}{\sqrt{-\kappa}}\right)^{n-1} & \text{if } \kappa<0.\end{cases}$$

We assume that the sectional curvature of $\mathcal{M}$ is bounded above by a constant κ, $\kappa\in\mathbb{R}$, and Ω satisfies the interior (δ,r)-cone condition. Let $J(x,\xi,t)$ be the density of the volume element in geodesic coordinates around x. That is

$$dV(y) = J(x,\xi,t)d_{\mathbb{S}_x}dt,\;\; y=\gamma_{x,\xi}(t),\; t<r(x,\xi).$$

By an extension of Günther's comparison theorem (see for instance [13]), J satisfies the following uniform lower bound

$$J(x,\xi,t)\geq s_\kappa(t).$$

Consequently, for some $r_0>0$,

$$V_\Omega(x,r)\geq V(\mathscr{C}(x,\omega_x,r))\geq c_0 r^n,\;\; x\in\Omega,\; 0<r\leq r_0, \tag{16}$$

We proceed similarly to the flat case to prove the following lemma.

Lemma 3.1. *Assume that $\mathcal{M}$ has sectional curvature bounded from above and satisfies following volume growth condition*

$$V(x,r) \le c_1 r^n, \ \ 0 < r \le r_1,$$

for some constants c_1 and r_1. If Ω is of finite diameter and satisfies the (δ, r)-cone condition, then V_Ω is doubling.

References

[1] S. Boutayeb, T. Coulhon and A. Sikora, A new approach to pointwise heat kernel upper bounds on doubling metric mesure spaces, *Advances in Math.* 270 (2015) 302-374.

[2] M. Choulli and L. Kayser, Gaussian lower bound for the Neumann Green function of a general parabolic operator, *Positivity*, DOI 10.1007/s11117-014-0319-z.

[3] T. Coulhon and A. Sikora, Gaussian heat kernel bounds via Phragmèn-Lindelöf theorem, *P*roc. London Math. Soc. 3, **96** (3) (2008) 507-544.

[4] E. B. Davies, One-parameter semigroups, Academic Press 1980.

[5] E. B. Davies, Heat kernels and spectral theory, Cambridge Tracts in Math. 92, Cambridge University Press, London 1989.

[6] E. B. Davies, L^p spectral independence and L^1 analyticity, *J. London Math. Soc.* (2) 52 (1995) 177-184.

[7] X. T. Duong, E. M. Ouhabaz and A.Sikora, Plancherel-type estimates and sharp spectral multipliers, *J. Funct. Anal.* **196** (2002) 443-485.

[8] D. Gromoll, W. Klingbenberg and W. Meyer, Riemannsche Geometrie im Grossen, Lecture Notes in Mathematics 55, Springer Verlag, Berlin-Heidelberg-New York, 1968.

[9] P. Gyrya and L. Saloff-Coste, Neumann and Dirichlet heat kernels in inner uniform domains, Astérisque No. 336, 2011.

[10] A. Grigor'yan, Gaussian upper bounds for the heat kernel on arbitrary manifolds, *J.* Diff. Geom. **45** (1) (1997) 33-52.

[11] E. Hebey, Sobolev spaces on Riemannian manifolds, Springer-Verlag, Berlin, 1996.

[12] A. Henrot M. Pierre, Variation et optimisation de formes, Mathématiques et Applications, vol. 48, Springer-Verlag, Berlin, 2005.

[13] B. R. Kloeckner and G. Kuperberg, A refinement of Günther's candle inequality, arXiv:1204.3943.

[14] P. Li and S.T. Yau, On the parabolic kernel of the Schrödinger operator, *A*cta Math. **156** (1986), 153-201.

[15] D. Mitrea, M. Mitrea and M. C. Shaw, Traces of differential forms on Lipschitz domains, the boundary De Rham complex, and Hodge decompositions, preprint.

[16] E.M. Ouhabaz, Gaussian estimates and holomorphy of semigroups, *P*roc Amer. Math. Soc. Vol. 123, no 5 (1995) 1465-1474.

[17] E.M. Ouhabaz, Analysis of heat equations on domains, London Math. Soc. Monographs, vol. 31, Princeton University Press 2004.

[18] L. Saloff-Coste, Pseudo-Poincaré inequalities and applications to Sobolev inequalities, Around the research of Vladimir Maz'ya. I, 349-372, *I*nt. Math. Ser. (N. Y.), 11, Springer, New York, 2010.

E-mail address: `mourad.choulli@univ-lorraine.fr`

E-mail address: `laurent.kayser@univ-lorraine.fr`

E-mail address: `Elmaati.Ouhabaz@math.u-bordeaux.fr`

Chapitre 5

Heat trace asymtotics and boundedness in the second order Sobolev space of isospectral potentials for the Dirichlet Laplacian

Published in *Asymptotic Analysis* 92 (2015) 259-278

HEAT TRACE ASYMPTOTICS AND BOUNDEDNESS IN THE SECOND ORDER SOBOLEV SPACE OF ISOSPECTRAL POTENTIALS FOR THE DIRICHLET LAPLACIAN

MOURAD CHOULLI§, LAURENT KAYSER¶, YAVAR KIAN†, AND ERIC SOCCORSI‡

Abstract. Let Ω be a C^∞-smooth bounded domain of $\mathbb{R}^n$, $n \geq 1$, and let the matrix $\mathbf{a} \in C^\infty(\overline{\Omega}; \mathbb{R}^{n^2})$ be symmetric and uniformly elliptic. We consider the $L^2(\Omega)$-realization A of the operator $-\mathrm{div}(\mathbf{a}\nabla \cdot)$ with Dirichlet boundary conditions. We perturb A by some real valued potential $V \in C_0^\infty(\Omega)$ and note $A_V = A + V$. We compute the asymptotic expansion of $\mathrm{tr}\left(e^{-tA_V} - e^{-tA}\right)$ as $t \downarrow 0$ for any matrix $\mathbf{a}$ with constant coefficients. In the particular case where A is the Dirichlet Laplacian in Ω, that is when $\mathbf{a}$ is the identity of $\mathbb{R}^{n^2}$, we make the four main terms appearing in the asymptotic expansion formula explicit and prove that L^∞-bounded sets of isospectral potentials of A are bounded in $H^2(\Omega)$.

Key words : Heat trace asymptotics, isospectral potentials.

Mathematics subject classification 2010 : 35C20

Contents

1. Introduction

In the present paper we investigate the compactness issue for isospectral potentials sets of the Dirichlet Laplacian by means of heat kernels asymptotics.

1.1. **Second order strongly elliptic operator.** Let $\mathbf{a} = (a_{ij})_{1 \leq i,j \leq n} n \geq 1$, be a symmetric matrix, with coefficients in $C^\infty(\mathbb{R}^n)$. We assume that $\mathbf{a}$ is uniformly elliptic, in the sense that there is a constant $\mu \geq 1$ such that the estimate

$$\mu^{-1} \leq \mathbf{a}(x) \leq \mu, \tag{1.1}$$

holds for all $x \in \mathbb{R}^n$ in the sense of quadratic forms on $\mathbb{R}^n$.

We consider a bounded domain $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, with C^∞ boundary $\partial\Omega$ and introduce the self-adjoint operator A generated in $L^2(\Omega)$ by the closed quadratic form

$$\mathfrak{a}[u] = \int_\Omega \mathbf{a}(x)\nabla u(x) \cdot \nabla u(x) dx,\ u \in D(\mathfrak{a}) = H_0^1(\Omega), \tag{1.2}$$

where $H_0^1(\Omega)$ is the closure of $C_0^\infty(\Omega)$ in the topology of the standard first-order Sobolev space $H^1(\Omega)$. Here ∇ stands for the gradient operator on $\mathbb{R}^n$. By straightforward computations we find out that A acts on its domain $D(A) = H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$, as

$$A = -\mathrm{div}(\mathbf{a}(x)\nabla\,\cdot\,) = -\sum_{i,j=1}^n \partial_j(a_{ij}(x)\partial_i\,\cdot\,). \tag{1.3}$$

Let $V \in C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ be real-valued. We define the perturbed operator $A_V = A + V$ as a sum in the sense of quadratic forms. Then we have $D(A_V) = D(A)$ by [RS2, Theorem X.12, page 162].

1.2. **Main results.** Put

$$Z_\Omega^V(t) = \mathrm{tr}\left(e^{-tA_V} - e^{-tA}\right),\ t > 0. \tag{1.4}$$

Much of the technical work developed in this paper is devoted to proving the existence of real coefficients $c_k(V)$, $k \geq 1$, depending only on V, such that following symptotic expansion

$$Z_\Omega^V(t) = t^{-n/2}\left(tc_1(V) + t^2c_2(V) + \ldots + t^pc_p(V) + O\left(t^{p+1}\right)\right),\ t \downarrow 0, \tag{1.5}$$

holds for $\mathbf{a}$ constant. Moreover we shall see that (1.4)-(1.5) remain valid upon replacing Ω by $\mathbb{R}^n$ in the definition of A (and subsequently $H_0^1(\Omega)$ by $H^1(\mathbb{R}^n)$ in (1.2)).

Since Ω is bounded then the injection $H_0^1(\Omega) \hookrightarrow L^2(\Omega)$ is compact. Thus the resolvent of A_V is a compact operator and A_V has a pure point spectrum. Let $\{\lambda_j^V,\ j \in \mathbb{N}^*\}$ be the non-decreasing sequence of the eigenvalues of A_V, repeated according to their multiplicities. We define the isospectral set associated with the potential $V \in C_0^\infty(\Omega)$ by

$$\mathrm{Is}(V) = \{W \in C_0^\infty(\Omega);\ \lambda_k^V = \lambda_k^W,\ k \in \mathbb{N}^*\}.$$

The computation carried out in section 5.2 of the coefficients $c_j(V)$ appearing in (1.5), for $j = 1, 2, 3, 4$, leads to the following result.

Theorem 1.1. *Let* $\mathbf{a}$ *be the identity of* $\mathbb{R}^{n^2}$. *Then for all* $V \in C_0^\infty(\Omega)$ *and any bounded subset* $\mathcal{B} \subset L^\infty(\Omega)$, *the set* $Is(V) \cap \mathcal{B}$ *is bounded in* $H^2(\Omega)$.

Since $H^2(\Omega)$ is compactly embedded in $H^s(\Omega)$, for any $s < 2$, Theorem 1.1 entails the:

Corollary 1.1. *Under the conditions of Theorem 1.1, the set* $Is(V) \cap \mathcal{B}$ *is compact in* $H^s(\Omega)$ *for each* $s \in (-\infty, 2)$.

It is worth mentioning that the method developed to calculate the first coefficients of the expansion formula (1.5) when $\mathbf{a}$ is the identity of $\mathbb{R}^{n^2}$ may be generalized to the case of a constant matrix $\mathbf{a}$ at the expense of heavier computations. Nevertheless, for the sake of computational simplicity, this specific part of the analysis was restricted to the case of the Laplace operator.

1.3. **What is known so far.** It turns out that the famous problem addressed by M. Kac in [Ka], as whether one can hear the shape of drum, is closely related to the following asymptotic expansion formula for the trace of $e^{t\Delta_g}$ on a compact Riemannian manifold (M, g):

$$\mathrm{tr}\left(e^{t\Delta_g}\right) = t^{-n/2}\left(e_0 + te_1 + t^2e_2 + \ldots + t^ke_k + O\left(t^{k+1}\right)\right). \tag{1.6}$$

Here Δ_g is the Laplace-Beltrami operator associated with the metric g and the coefficients e_k, $k \geq 0$, are Riemannian invariants depending on the curvature tensor and its covariant derivatives. There is a wide mathematical literature about (1.6), with many authors focusing more specifically on the explicit calculation of e_k, $k \geq 0$. This is due to the fact that these coefficients actually provide useful information on g and consequently on the geometry of the manifold M. The key point in the proof of (1.6) is the construction of a parametrix for the heat equation $\partial_t - \Delta_g$, which was initiated by S. Minakshisudaram and Å. Pleijel in [MP].

A survey on isospectral manifolds can be found in [GPS]. This problem is still at the center of the attention of geometers. As a matter of fact Dryden, Gordon, Greenwald and Webb recently calculated the asymptotic expansion of the heat kernel for orbifolds in [DGGW]. In the same spirit, the heat trace asymptotics for general connections has been expressed by Beneventano, Gilkey, Kirsten and Santangelo in [BGKS].

Since the present work is not directly related to the analysis of the asymptotic expansion formula (1.6), we shall not go into that matter further and we refer to [BGM, Ch, Gi2, Ka, MS] for more details.

The asymptotic expansion formula (1.5), for the Laplacian in the whole space, was proved by Y. Colin de Verdière in [Co] by adapting (1.6). An alternative proof, based on the Fourier transform, was given in [BB] by R. Bañuelos and A. Sá Barreto. The approach developed in this text is rather different in the sense that (1.5) is obtained by linking the heat kernel of e^{-tA_V} to the one of e^{-tA} through Duhamel's formula. The asymptotic expansion formulae (1.5) and (1.6) are nevertheless quite similar, but, here, the coefficients c_k, $k \geq 1$, are given as integrals over Ω of polynomial functions in V and its derivatives. This situation is reminiscent of [BB, Theorem 2.1, page 2154] where the same coefficients are expressed in terms of the tensor products $\widehat{V} \otimes \ldots \otimes \widehat{V}$, where $\widehat{V}$ is the Fourier transform of the potential V. Let us finally mention that Colin de Verdière obtained a semi-classical trace formula for heat kernels of magnetic Schrödinger operators in [Co2]

As will appear in section 5, the proof of the compactness Theorem 1.1 boils down to the calculation of the four main terms in the asymptotic expansion formula (1.5). This follows from the basic identity

$$\sum_{k \geq 1} e^{-\lambda_k^V t} = \mathrm{tr}\left(e^{-tA_V}\right) = \mathrm{tr}\left(e^{-tA}\right) + Z_\Omega^V(t),$$

linking the isospectral sets of A_V to the heat trace of A. Compactness results for isospectral potentials associated with the operator $\Delta_g + V$ were already obtained by Brüning in [Br, Theorem 3, page 696] for a compact Riemannian manifold with dimension no greater than 3, and further improved by Donnelly in [Don]. Their approach is based on trace asymptotics borrowed to [Gi1, Theorem 4.3, page 230]. Our strategy is rather similar but the heat kernels asymptotics needed in this text are explicitly computed in the first part of the article.

1.4. **Outline.** Section 2 gathers several definitions and auxiliary results on heat kernels and trace asymptotics needed in the remaining part of the article. The asymptotic formula (1.5) is established in Section 3. Finally section 5 contains the proof of Theorem 1.1.

2. Preliminaries

In this section we introduce some notations used throughout this text and derive auxiliary results needed in the remaining part of this paper.

2.1. **Heat kernels and trace asymptotics.** With reference to the definitions and notations introduced in section 1 we first recall from [Ou, Chapter 4, page 102] that the operator $-A_V$, where $V \in C_0^\infty(\Omega)$, generates an analytic semi-group e^{-tA_V} on $L^2(\Omega)$. We denote K^V the heat kernel associated with e^{-tA_V}, in such a way that the identity

$$\left(e^{-tA_V} f\right)(x) = \int_\Omega K^V(t,x,y) f(y) dy,\ t > 0,\ x \in \Omega, \tag{2.1}$$

holds for every $f \in L^2(\Omega)$. Let M_V be the multiplication operator induced by V. Then we have

$$e^{-tA_V} = e^{-tA} - \int_0^t e^{-(t-s)A} M_V e^{-sA_V} ds,\ t > 0,$$

from Duhamel's formula. From this and (2.1) then follows that

$$K^V(t,x,y) = K(t,x,y) - \int_0^t \int_\Omega K(t-s,x,z)V(z)K^V(s,z,y)dzds,\ t>0,\ x,y\in\Omega, \tag{2.2}$$

where K denotes the heat kernel of e^{-tA}. Upon solving the integral equation (2.2) with the unknown function K^V by the successive approximation method, we obtain that

$$K^V(t,x,y) = \sum_{j\geq 0} K_j^V(t,x,y),\ t>0,\ x,y\in\Omega, \tag{2.3}$$

with

$$K_0^V(t,x,y) = K(t,x,y) \text{ and } K_{j+1}^V(t,x,y) = -\int_0^t \int_\Omega K(t-s,x,z)V(z)K_j^V(s,z,y)dsdz \text{ for all } j\in\mathbb{N}. \tag{2.4}$$

Thus, for each $t>0$ and $x,y\in\Omega$, we get by induction on $j\in\mathbb{N}^*$ that

$$K_j^V(t,x,y) = (-1)^j \int_{\Omega^n}\int_0^t\int_0^{t_1}\dots\int_0^{t_{j-1}} \left[\prod_{i=1}^j K(t_{i-1}-t_i,z_{i-1},z_i)V(z_i)\right] K(t_j,z_j,y)dz^j dt^j,$$

where $t_0=t$, $z_0=x$, and $du^j = du_1\dots du_j$ for $u=z,t$. From this, the following reproducing property

$$\int_\Omega K(t-s,x,z)K(s,z,y)dz = K(t,x,y),\ t>0,\ s\in(0,t),\ x,y\in\Omega, \tag{2.5}$$

and the estimate $K\geq 0$, arising from [Fr], then follows that

$$|K_j^V(t,x,y)| \leq \frac{\|V\|_\infty^j t^j}{j!} K(t,x,y),\ t>0,\ x,y\in\Omega,\ j\in\mathbb{N}. \tag{2.6}$$

Therefore, for any fixed $x,y\in\Omega$, the series in the right hand side of (2.3) converges uniformly in $t>0$.

Having said that we consider the fundamental solution Γ to the equation

$$\partial_t - \mathrm{div}(\mathbf{a}(x)\nabla\cdot\,) = \partial_t - \sum_{i,j=1}^n \partial_j(a_{ij}(x)\partial_i\ ,\cdot\,) = 0 \text{ in } \mathbb{R}^n.$$

Then there is a constant $c>0$, depending only on n and μ, such that we have

$$\Gamma(t,x,y) \leq (ct)^{-n/2} e^{-c|x-y|^2/t},\ t>0,\ x,y\in\mathbb{R}^n, \tag{2.7}$$

according to [FS]. Further, arguing as in the proof of Lemma 2.1 below, it follows from the maximum principle that

$$0\leq K(t,x,y)\leq \Gamma(t,x,y),\ t>0,\ x,y\in\Omega. \tag{2.8}$$

Thus, by (2.6)-(2.7), for all fixed $t>0$, the series in the right hand side of (2.3) converges uniformly with respect to x and y in Ω, and we have

$$\int_\Omega K^V(t,x,x)dx = \sum_{j\geq 0} A_j^V(t) \text{ where } A_j^V(t) = \int_\Omega K_j^V(t,x,x)dx,\ j\in\mathbb{N}. \tag{2.9}$$

As λ_k^V scales like $k^{2/n}$ by [Kav, Lemma 3.1, page 229] then we have $\sum_{k=1}^\infty e^{-t\lambda_k^V} < \infty$, hence e^{-tA_V} is trace class since $\sigma(e^{-tA_V})\setminus\{0\} = \{e^{-t\lambda_k^V},\ k\geq 1\}$ from the spectral theorem (see e.g. [EnNa1, Corollary 3.2, page 289] or [EnNa2, Corollary 2.10, page 183]). On the other hand, e^{-tA_V} being an integral operator with smooth kernel (see e.g. [Da]), we have

$$\mathrm{tr}\left(e^{-tA_V}\right) = \int_\Omega K^V(t,x,x)dx = \sum_{k\geq 1} e^{-t\lambda_k^V},\ t>0. \tag{2.10}$$

Notice that the right identity in (2.10) is a direct consequence of Mercer's theorem (see e.g. [Ho]), entailing

$$K^V(t,x,y) = \sum_{k\geq 1} e^{-t\lambda_k^V}\phi_k^V(x)\times\phi_k^V(y),\ t>0,\ x,y\in\Omega,$$

where $\{\phi_k^V,\ k \in \mathbb{N}^*\}$ is an orthonormal basis of eigenfunctions ϕ_k^V of A_V, associated with the eigenvalue λ_k^V. Finally, putting (1.4) and (2.9)-(2.10) together, we find out that

$$Z_\Omega^V(t) = \sum_{j\geq 1} A_j^V(t),\ t > 0. \tag{2.11}$$

2.2. **Estimation of Green functions.** We start with the following useful comparison result:

Lemma 2.1. *For $\delta > 0$ put $\Omega_\delta = \{x \in \Omega;\ \mathrm{dist}(x, \partial\Omega) > \delta\}$. Then we have*

$$0 \leq \Gamma(t,x,y) - K(t,x,y) \leq (ct)^{-n/2} e^{-c\delta^2/t},\ 0 < t \leq \frac{2c\delta^2}{n},\ x \in \Omega,\ y \in \Omega_\delta,$$

where c is the constant appearing in the right hand side of (2.7).

Proof. Fix $y \in \Omega_\delta$. Then $u_y(t,x) = \Gamma(t,x,y) - K(t,x,y)$ being the solution to the following initial boundary value problem

$$\begin{cases} \partial_t u_y(t,x) - \sum_{i,j=1}^n \partial_j (a_{ij}\partial_i u_y(t,x)) = 0, & t > 0,\ x \in \Omega, \\ u_y(0,x) = 0, & x \in \Omega, \\ u_y(t,x) = \Gamma(t,x,y), & t > 0,\ x \in \partial\Omega, \end{cases}$$

we get from the parabolic maximum principle (see e.g. [Fr]) that $u_y(t,x) \leq \max_{\substack{z\in\partial\Omega \\ 0<s\leq t}} \Gamma(s,z,y)$. Therefore we have

$$u_y(t,x) \leq \max_{\substack{z\in\partial\Omega \\ 0<s\leq t}} (cs)^{-n/2} e^{-c|z-y|^2/s} \leq \max_{0<s\leq t} (cs)^{-n/2} e^{-c\delta^2/s},\ t > 0,\ x \in \Omega,$$

by (2.7). Now the desired result follows readily from this and (2.8) upon noticing that $s \mapsto (cs)^{-n/2} e^{-c\delta^2/s}$ is non-decreasing on $(0, 2c\delta^2/n)$. □

Remark 2.1. a) The functions $K(t,\cdot,\cdot)$ and $\Gamma(t,\cdot,\cdot)$ being symmetric for all $t > 0$, the statement of Lemma 2.1 remains valid for $x \in \Omega_\delta$ and $y \in \Omega$ as well.
b) A result similar to Lemma 2.1 can be found in [Mi] for the Dirichlet Laplacian, which corresponds to the operator A in the particular case where $\mathbf{a}$ is the identity matrix. This claim, which was actually first proved by H. Weyl in [We], is a cornerstone in the derivation of the classical Weyl's asymptotic formula for the eigenvalues counting function (see e.g. [Dod]).
c) We refer to [Co] for an alternative proof of Lemma 2.1 that is based on the classical Feynman-Kac formula (see e.g. [SV]) instead of the maximum principle.

Let us extend $V \in C_0^\infty(\Omega)$ to $\mathbb{R}^n$ by setting $V(x) = 0$ for all $x \in \mathbb{R}^n \setminus \Omega$, and, with reference to (2.3)-(2.4), put

$$\Gamma_0^V(t,x,y) = \Gamma(t,x,y) \text{ and } \Gamma_{j+1}^V(t,x,y) = -\int_0^t \int_{\mathbb{R}^n} \Gamma(t-s,x,z)V(z)\Gamma_j^V(s,z,y)dsdz, j \in \mathbb{N}, \tag{2.12}$$

for all $t > 0$ and $x, y \in \mathbb{R}^n$. Armed with Lemma 2.1 we may now relate the asymptotic behavior of $A_j^V(t)$ as $t \downarrow 0$ to the one of

$$B_j^V(t) = \int_\Omega \Gamma_j^V(t,x,x)dx,\ t > 0,\ j \in \mathbb{N}. \tag{2.13}$$

Proposition 2.1. *Let $j \in \mathbb{N}^*$. Then for each $k \in \mathbb{N}$ we have $A_j^V(t) = B_j^V(t) + O(t^k)$ as $t \downarrow 0$.*

Proof. Choose $\delta > 0$ so small that $\mathrm{supp}(V) \subset \Omega_\delta$, where Ω_δ is the same as in Lemma 2.1, and pick $t \in (0, 2c\delta^2/n)$. Then, for all $x, y \in \Omega$, we have

$$\begin{aligned} |\Gamma_1^V(t,x,y) - K_1^V(t,x,y)| &\leq \int_0^t \int_{\Omega_\delta} \Gamma(t-s,x,z)|V(z)|[\Gamma(s,z,y) - K(s,z,y)]dzds \\ &+ \int_0^t \int_{\Omega_\delta} [\Gamma(t-s,x,z) - K(t-s,x,z)]|V(z)|K(s,z,y)dzds, \end{aligned}$$

by (2.4) and (2.12). This, together with Lemma 2.1 and part a) in Remark 2.1, yields

$$|\Gamma_1^V(t,x,y)-K_1^V(t,x,y)|\le \|V\|_\infty (ct)^{-n/2}e^{-c\delta^2/t}\left(\int_0^t\int_{\mathbb{R}^n}\Gamma(s,x,z)dzds+\int_0^t\int_{\mathbb{R}^n}\Gamma(s,z,y)dzds\right), \tag{2.14}$$

for all $t>0$ and a.e. $x,y\in\Omega$. Here we used the estimate $0\le K\le\Gamma$ and the fact that the function $s\mapsto (cs)^{-n/2}e^{-c\delta^2/s}$ is non-decreasing on $(-\infty,2c\delta^2/n]$. Further, due to (2.7), there is a positive constant C, independent of t, such that

$$\int_0^t\int_{\mathbb{R}^n}\Gamma(s,x,z)dzds+\int_0^t\int_{\mathbb{R}^n}\Gamma(s,z,y)dzds\le Ct,\ t>0,x,y\in\Omega,$$

so we obtain

$$|\Gamma_1^V(t,x,y)-K_1^V(t,x,y)|\le C\|V\|_\infty t(ct)^{-n/2}e^{-c\delta^2/t},\ t>0,\ x,y\in\Omega,$$

by (2.14). Similarly, using (2.6) and arguing as above, we get

$$|\Gamma_j^V(t,x,y)-K_j^V(t,x,y)|\le (C\|V\|_\infty)^j\frac{t^j}{j!}(ct)^{-n/2}e^{-c\delta^2/t},\ t>0,\ x,y\in\Omega,$$

by induction on $j\in\mathbb{N}^*$. Now the result follows from this, (2.9) and (2.13). □

2.3. **The case of a constant metric.** We now express the function $(t,x)\in\mathbb{R}_+^*\times\mathbb{R}^n\mapsto\Gamma_j^V(t,x,x)$, $j\in\mathbb{N}^*$, defined by (2.12), in terms of the heat kernel Γ and the perturbation V, in the particular case where $\mathbf{a}$ is constant. Since $\mathbf{a}$ is regular (i.e. invertible) by (1.1) then $\Gamma(t,x,y)$ is explicitly known and coincides with the following Gaussian kernel

$$G(t,x-y)=(4\pi t)^{-n/2}\left(\det\mathbf{a}^{-1}\right)^{-1/2}e^{-\mathbf{a}^{-1}(x-y)\cdot(x-y)/(4t)},\ t>0,\ x,y\in\mathbb{R}^n, \tag{2.15}$$

where $\mathbf{a}^{-1}$ is the inverse matrix of $\mathbf{a}$. The result is as follows.

Lemma 2.2. *Assume that* $\mathbf{a}$ *is constant and fix* $j\in\mathbb{N}^*$. *Then we have*

$$\begin{aligned}\Gamma_j^V(t,x,x) &= (-1)^jt^{j-n/2}\int_{(\mathbb{R}^n)^j}\int_0^1\int_0^{s_1}\dots\int_0^{s_{j-1}}\left[\prod_{i=1}^jG(s_{i-1}-s_i,w_{i-1}-w_i)V(x+\sqrt{t}w_i)\right]\\ &\qquad\times G(s_j,w_j)ds^jdw^j,\end{aligned}$$

for all $t>0$ *and* $x\in\mathbb{R}^n$, *where* G *is defined by* (2.15). *Here we have set* $s_0=1$, $w_0=0$ *and* $du^j=du_1\dots du_j$ *for* $u=s,w$.

Proof. The main benefit of dealing with a constant matrix $\mathbf{a}$ is the following property:

$$\Gamma(ts,x,y)=t^{-n/2}\Gamma\left(s,\frac{x}{\sqrt{t}},\frac{y}{\sqrt{t}}\right),\ t,s>0,\ x,y\in\mathbb{R}^n.$$

From this and the following identity arising from (2.12) for all $t>0$ and $x,y\in\mathbb{R}^n$,

$$\Gamma_j^V(t,x,y) = (-1)^jt^j\int_{(\mathbb{R}^n)^j}\int_0^1\int_0^{s_1}\dots\int_0^{s_{j-1}}\left[\prod_{i=1}^j\Gamma(t(s_{i-1}-s_i),z_{i-1},z_i)V(z_i)\right]\Gamma(ts_j,z_j,y)ds^jdz^j,$$

with $z_0=x$, then follows that

$$\begin{aligned}&\Gamma_j^V(t,x,y)\\ &= (-1)^jt^{j-(j+1)n/2}\int_{(\mathbb{R}^n)^j}\int_0^1\int_0^{s_1}\dots\int_0^{s_{j-1}}\left[\prod_{i=1}^j\Gamma\left(s_{i-1}-s_i,\frac{z_{i-1}}{\sqrt{t}},\frac{z_i}{\sqrt{t}}\right)V(z_i)\right]\Gamma\left(s_j,\frac{z_j}{\sqrt{t}},\frac{y}{\sqrt{t}}\right)ds^jdz^j.\end{aligned}$$

Thus, by performing the change of variables $(z_1, \dots z_j) = \sqrt{t}(w_1, \dots w_j) + (x, \dots, x)$ in the above integral, we find out that

$$\Gamma_j^V(t,x,y) = (-1)^j t^{j-n/2} \int_{(\mathbb{R}^n)^j} \int_0^1 \int_0^{s_1} \dots \int_0^{s_{j-1}} \left[\prod_{i=1}^j \Gamma\left(s_{i-1}-s_i, \frac{x}{\sqrt{t}}+w_{i-1}, \frac{x}{\sqrt{t}}+w_i\right) V\left(x+\sqrt{t}w_i\right)\right] \times \Gamma\left(s_j, \frac{x}{\sqrt{t}}+w_j, \frac{y}{\sqrt{t}}\right) ds^j dw^j.$$

Finally, we obtain the desired result upon taking $y = x$ in the above identity and recalling that Γ verifies

$$\Gamma\left(t, \frac{x}{\sqrt{t}}+z, \frac{x}{\sqrt{t}}+w\right) = \Gamma(t,z,w) = G(t, z-w),$$

for all $t > 0$ and x, z, w in $\mathbb{R}^n$. $\square$

3. Asymptotic expansion formulae

In this section we establish the asymptotic expansion formula (1.5). The strategy of the proof is, first, to establish (1.5) where

$$Z^V(t) = \mathrm{tr}(e^{-tH_V} - e^{-tH}),\ t > 0, \tag{3.1}$$

is substituted for $Z_\Omega^V(t)$, and, second, to relate the asymptotics of $Z_\Omega^V(t)$ as $t \downarrow 0$ to the one of $Z^V(t)$.

Here H is the self-adjoint operator generated in $L^2(\mathbb{R}^n)$ by the closed quadratic form

$$\mathfrak{h}[u] = \int_{\mathbb{R}^n} \mathbf{a}(x)\nabla u(x) \cdot \nabla u(x) dx,\ u \in D(\mathfrak{h}) = H^1(\mathbb{R}^n),$$

and $H_V = H + V$ as a sum in the sense of quadratic forms. It is easy to check that H acts on its domain $D(H) = H^2(\mathbb{R}^n)$, the second-order Sobolev space on $\mathbb{R}^n$, as the right hand side of (1.3). Moreover we have $D(H_V) = D(H)$ since $V \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$. In other words H (resp., H_V) may be seen as the extension of the operator A (resp., A_V) acting in $L^2(\mathbb{R}^n)$, and, due to (2.12) and (3.1), we have

$$Z^V(t) = \sum_{j\geq 1} H_j^V(t),\ t > 0,\ \text{where } H_j^V(t) = \int_{\mathbb{R}^n} \Gamma_j^V(t,x,x)dx,\ j \in \mathbb{N}. \tag{3.2}$$

In light of this and Lemma 2.2, we apply Taylor's formula to $V \in C_0^\infty(\Omega)$, getting for all $j \geq 1$ and $p \geq 1$,

$$\prod_{k=1}^j V(x+tw_k) = \sum_{\ell=0}^{p-1} t^\ell \left[\sum_{|\alpha_1|+\dots|\alpha_j|=\ell} \frac{1}{\alpha_1! \dots \alpha_j!} \prod_{k=1}^j \partial^{\alpha_k} V(x) w_k^{\alpha_k}\right] + t^p R_j^p(t,x,w_1\dots,w_j), \tag{3.3}$$

where

$$R_j^p(t,x,w_1\dots,w_j) = \sum_{|\alpha_1|+\dots|\alpha_j|=p} \frac{p}{\alpha_1!\dots\alpha_j!} \int_0^1 (1-s)^{p-1} \prod_{k=1}^j \partial^{\alpha_k} V(x+stw_k) w_k^{\alpha_k} ds. \tag{3.4}$$

For the sake of notational simplicity we note

$$\alpha^j = (\alpha_1^j, \dots, \alpha_j^j) \in (\mathbb{N}^n)^j,\ \alpha^j! = \prod_{k=1}^j \alpha_k^j! \text{ and } W_j^{\alpha^j} = \prod_{k=1}^j w_k^{\alpha_k^j}, \tag{3.5}$$

so that (3.3)-(3.4) may be reformulated as

$$\prod_{k=1}^j V(x+tw_k) = \sum_{\ell=0}^{p-1} t^\ell \left[\sum_{|\alpha^j|=\ell} \frac{W_j^{\alpha^j}}{\alpha^j!} \prod_{k=1}^j \partial^{\alpha_k^j} V(x)\right] + t^p R_j^p(t,x,w_1\dots,w_j), \tag{3.6}$$

with

$$R_j^p(t,x,w_1\dots,w_j) = \sum_{|\alpha^j|=p} \frac{pW_j^{\alpha^j}}{\alpha^j!} \int_0^1 (1-s)^{p-1} \prod_{k=1}^j \partial^{\alpha_k} V(x+stw_k) ds,\ j,p \in \mathbb{N}^*. \tag{3.7}$$

Next, with reference to (3.5) we define for further use

$$c_{\alpha^j}=\frac{1}{\alpha^j!}\int_{(\mathbb{R}^n)^j}\int_0^1\int_0^{s_1}\dots\int_0^{s_{j-1}}W_j^{\alpha^j}\left[\prod_{i=1}^{j}G(s_{i-1}-s_i,w_{i-1}-w_i)\right]G(s_j,w_j)ds^jdw^j, \tag{3.8}$$

where, as usual, $s_0=1$, $w_0=0$, and du^j stands for $du_1\dots du_j$ with $u=s,w$. Putting

$$P_{\alpha^j}(V)=\int_\Omega\prod_{k=1}^{j}\partial^{\alpha_k^j}V(x)dx,\ j\in\mathbb{N}^*, \tag{3.9}$$

we may now state the main result of this section.

Proposition 3.1. *For any $p\in\mathbb{N}^*$, the asymptotics of $Z^V(t)$ and $Z_\Omega^V(t)$ as $t\downarrow 0$ have the expression*

$$\sum_{\ell=1}^{p}t^\ell\mathcal{P}_{2\ell}(V)+O(t^{p+1}),$$

where

$$\mathcal{P}_\ell(V)=\sum_{1\le j\le \ell/2}(-1)^j\sum_{|\alpha^j|=\ell-2j}c_{\alpha^j}P_{\alpha^j}(V), \tag{3.10}$$

the coefficients c_{α^j} and $P_{\alpha^j}(V)$ being defined by (3.8)-(3.9).

Proof. In view of (2.13), Lemma 2.2 and (3.9) we have

$$t^nB_j^V(t^2)=(-1)^j\sum_{\ell=0}^{p-1}t^{\ell+2j}\sum_{|\alpha^j|=\ell}c_{\alpha^j}P_{\alpha^j}(V)+O(t^{p+2j}),\ t>0,\ j\in\mathbb{N}^*,$$

and hence

$$t^nB_j^V(t^2)=(-1)^j\sum_{\ell=2j}^{p-1}t^{\ell}\sum_{|\alpha^j|=\ell-2j}c_{\alpha^j}P_{\alpha^j}(V)+O(t^{p}),\ t>0,\ j\in\mathbb{N}^*.$$

Summing up the above identity over all integers j between 1 and $(p-1)/2$, we find that

$$t^n\sum_{1\le j\le(p-1)/2}B_j^V(t^2)=\sum_{1\le j\le(p-1)/2}(-1)^j\sum_{\ell=2j}^{p-1}t^\ell\sum_{|\alpha^j|=\ell-2j}c_{\alpha^j}P_{\alpha^j}(V)+O(t^p)$$

and hence

$$t^n\sum_{1\le j\le(p-1)/2}B_j^V(t^2)=\sum_{\ell=2}^{p-1}t^\ell\sum_{1\le j\le\ell/2}(-1)^j\sum_{|\alpha^j|=\ell-2j}c_{\alpha^j}P_{\alpha^j}(V)+O(t^p).$$

As a consequence we have $t^n\sum_{1\le j\le(p-1)/2}B_j^V(t^2)=\sum_{\ell=2}^{p-1}t^\ell\mathcal{P}_\ell(V)+O(t^p)$, hence

$$t^n\sum_{j\ge1}B_j^V(t^2)=\sum_{\ell=2}^{p-1}t^\ell\mathcal{P}_\ell(V)+O(t^p). \tag{3.11}$$

Now, upon performing the change of variables $(w_1,\dots,w_j)\longrightarrow(-w_1,\dots,-w_j)$ in the right hand side of (3.8) we get that $c_{\alpha^j}=(-1)^{|\alpha^j|}c_{\alpha^j}$. Therefore $c_{\alpha^j}=0$ for $|\alpha^j|$ odd. As a consequence we have

$$\mathcal{P}_{2\ell+1}(V)=\sum_{1\le j\le\ell}(-1)^j\sum_{|\alpha^j|=2(\ell-j)+1}c_{\alpha^j}P_{\alpha_j}(V)=0.$$

Thus, applying (3.11) where $2(p+1)$ is substituted for p, we find out that

$$t^n\sum_{j\ge1}B_j^V(t^2)=\sum_{\ell=2}^{2p+1}t^\ell\mathcal{P}_\ell(V)+O(t^{2(p+1)})=\sum_{\ell=1}^{p}t^{2\ell}\mathcal{P}_{2\ell}(V)+O(t^{2(p+1)}),$$

which, in turn, yields

$$t^{n/2}\sum_{j\geq 1} B_j^V(t)=\sum_{\ell=1}^{p} t^{\ell}\mathcal{P}_{2\ell}(V)+O(t^{p+1}). \tag{3.12}$$

Next, bearing in mind that V is supported in Ω, we see that $P_{\alpha^j}(V)=\int_{\mathbb{R}^n}\prod_{k=1}^{j}\partial^{\alpha_k^j}V(x)dx$ for all $j\in\mathbb{N}^*$. This entails

$$t^{n/2}\sum_{j\geq 1} H_j^V(t)=\sum_{\ell=1}^{p} t^{\ell}\mathcal{P}_{2\ell}(V)+O(t^{p+1}). \tag{3.13}$$

upon substituting (3.2) for (2.13) in the above reasoning. Finally, putting (2.11), (3.12) and Proposition 2.1 (resp. (3.2) and (3.13)) together we obtain the result for Z_Ω^V (resp. Z^V). □

Proposition 3.1 immediately entails the:

Corollary 3.1. *Let $V_0\in C_0^\infty(\Omega)$. Then, under the conditions of Proposition 3.1, each $V\in Is(V_0)$ verifies*

$$\mathcal{P}_\ell(V)=\mathcal{P}_\ell(V_0),\ \ell\geq 2.$$

Remark 3.1. It is clear that the asymptotic formula stated in Proposition 3.1 for Z^V remains valid if V is taken in the Schwartz class $\mathscr{S}(\mathbb{R}^n)$.

4. Two parameter integrals

In this section we collect useful properties of two parameter integrals appearing in the proof of Theorem 1.1, presented in section 5. As a preamble we consider the integral

$$I_n(f)=\int_{\mathbb{R}^n}\int_{\mathbb{R}^n}\int_0^1\int_0^{s_1} f(w_1,w_2)G(1-s_1,w_1)G(s_1-s_2,w_1-w_2)G(s_2,w_2)dw_1dw_2ds_1ds_2, \tag{4.1}$$

where $f\in C^\infty(\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n)$ and G is defined by (2.15). For all $\sigma\in\sigma_n$, the set of permutations of $\{1,\dots,n\}$, and all $z=(z_1,\dots,z_n)\in\mathbb{R}^n$, we write $\sigma z=(z_{\sigma(1)},\dots,z_{\sigma(n)})$. Similarly, for every $w_1,w_2\in\mathbb{R}^n$, we note $\sigma(w_1,w_2)=(\sigma w_1,\sigma w_2)$ and $f\circ\sigma(w_1,w_2)=f(\sigma(w_1,w_2))$. The following result gathers several properties of I_n that are required in the remaining part of this section.

Lemma 4.1. *Let $f\in C^\infty(\mathbb{R}^n\times\mathbb{R}^n)$. Then it holds true that:*

i) $I_n(f)=I_n(Sf)$, where S denotes the "mirror symmetry" operator acting as $Sf(w_1,w_2)=f(w_2,w_1)$;
ii) $I_n(f)=I_n(f\circ\sigma)$ for all $\sigma\in\sigma_n$;
iii) If there are $f_k\in C^\infty(\mathbb{R}\times\mathbb{R})$, $k=1,\dots,n$, such that

$$f(w_1,w_2)=\prod_{k=1}^{n} f_k(w_1^k,w_2^k),\ w_i=(w_i^1,\dots,w_i^n), i=1,2,$$

and if any of the f_k is an odd function of (w_1^k,w_2^k), then we have $I_n(f)=0$.

Proof. i) Upon performing successively the two changes of variables $\tau_1=1-s_1$ and $\tau_2=1-s_2$ in the right hand side of (4.1), we get that

$$\begin{aligned} I_n(f) &= \int_{\mathbb{R}^n}\int_{\mathbb{R}^n}\int_0^1\int_{\tau_1}^1 f(w_1,w_2)G(\tau_1,w_1)G(\tau_2-\tau_1,w_1-w_2)G(1-\tau_2,w_2)dw_1dw_2d\tau_2d\tau_1 \\ &= \int_{\mathbb{R}^n}\int_{\mathbb{R}^n}\int_0^1\int_0^{\tau_2} f(w_1,w_2)G(\tau_1,w_1)G(\tau_2-\tau_1,w_1-w_2)G(1-\tau_2,w_2)dw_1dw_2d\tau_1d\tau_2, \end{aligned}$$

so the result follows by relabelling (w_1,w_2) as (w_2,w_1).
ii) In light of (2.15) we have $G(t,w)=G(t,\sigma^{-1}w)$ for all $t>0$, $w\in\mathbb{R}^n$ and $\sigma\in\sigma_n$, hence $I_n(f)$ is equal to

$$\int_{\mathbb{R}^n}\int_{\mathbb{R}^n}\int_0^1\int_0^{s_1} f(w_1,w_2)G(1-s_1,\sigma^{-1}w_1)G(s_1-s_2,\sigma^{-1}w_1-\sigma^{-1}w_2)G(s_2,\sigma^{-1}w_2)dw_1dw_2ds_1ds_2,$$

according to (4.1). The result follows readily from this upon performing the change of variable $(\widetilde{w}_1, \widetilde{w}_2) = \sigma^{-1}(w_1, w_2)$.
iii) This point is a direct consequence of the obvious identity $I_n(f) = \prod_{k=1}^n I_1(f_k)$, arising from (2.15) and (4.1). □

We turn now to evaluating integrals of the form

$$I_{\alpha,\beta} = I_{\alpha,\beta}(s_1, s_2) = \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} x^\alpha y^\beta g(1-s_1, x) g(s_1 - s_2, x-y) g(s_2, y) dxdy,\ \alpha, \beta \in \mathbb{N},\ s_1, s_2 \in \mathbb{R}, \tag{4.2}$$

where g denotes the one-dimensional Gaussian kernel defined by (2.15) in the particular case where $n = 1$. This can be achieved upon using the following result.

Lemma 4.2. *Let $\alpha, \beta \in \mathbb{N}$. If $\alpha + \beta$ is odd we have $I_{\alpha,\beta} = 0$ and if $\alpha + \beta$ is even, it holds true for all $s_1, s_2 \in \mathbb{R}$ that*

i) $I_{1,1}(s_1, s_2) = 2(4\pi)^{-1/2}(1-s_1)s_2$;
ii) $I_{\alpha,\beta}(s_1, s_2) = 2(1-s_1)s_2\left[2(\alpha-1)(\beta-1)(s_1-s_2)I_{\alpha-2,\beta-2}(s_1,s_2) + (\alpha+\beta-1)I_{\alpha-1,\beta-1}(s_1,s_2)\right]$;
iii) $I_{\alpha,\beta}(s_1, s_2) = 2(1-s_1)\left[(\alpha-1)s_1 I_{\alpha-2,\beta}(s_1,s_2) + \beta s_2 I_{\alpha-1,\beta-1}(s_1,s_2)\right]$;
iv) $I_{\alpha,\beta}(s_1, s_2) = 2(1-s_1)\left[(\alpha+\beta-1)s_1 I_{\alpha-2,\beta}(s_1,s_2) - 2\beta(\beta-1)s_2(s_1-s_2)I_{\alpha-2,\beta-2}(s_1,s_2)\right]$;
v) $I_{2\alpha,0}(s_1, s_2) = (4\pi)^{-1/2}(2\alpha)!/(\alpha!)s_1^\alpha(1-s_1)^\alpha$;
vi) $I_{0,2\alpha}(s_1, s_2) = (4\pi)^{-1/2}(2\alpha)!/(\alpha!)s_2^\alpha(1-s_2)^\alpha$.

Proof. a) In light of the basic identity

$$zg(t,z) = -2t\partial_z g(t,z),\ t > 0,\ z \in \mathbb{R}, \tag{4.3}$$

we have

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} xyg(1-s_1,x)g(s_1-s_2,x-y)g(s_2,y)dxdy \\ = & -2(1-s_1)\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} y\partial_x g(1-s_1,x)g(s_1-s_2,x-y)g(s_2,y)dxdy \\ = & \ 2(1-s_1)\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} yg(1-s_1,x)\partial_x g(s_1-s_2,x-y)g(s_2,y)dxdy, \end{aligned}$$

by integrating by parts. Thus, applying (4.3) once more, we obtain that

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} xyg(1-s_1,x)g(s_1-s_2,x-y)g(s_2,y)dxdy \\ = & -2(1-s_1)\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} yg(1-s_1,x)\partial_y g(s_1-s_2,x-y)g(s_2,y)dxdy \\ = & \ 2(1-s_1)\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} yg(1-s_1,x)g(s_1-s_2,x-y)\partial_y g(s_2,y)dxdy + 2(1-s_1)(4\pi)^{-1/2} \\ = & \ 2(1-s_1)\int_{\mathbb{R}} yg(1-s_2,y)\partial_y g(s_2,y)dy + 2(1-s_1)(4\pi)^{-1/2}, \end{aligned} \tag{4.4}$$

with the help of the reproducing property. On the other hand, an integration by parts gives

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}} yg(1-s_2,y)\partial_y g(s_2,y)dy &= -\int_{\mathbb{R}} g(1-s_2,y)g(s_2,y)dy - \int_{\mathbb{R}} y\partial_y g(1-s_2,y)g(s_2,y)dy \\ &= -(4\pi)^{-1/2} - \frac{s_2}{1-s_2}\int_{\mathbb{R}} yg(1-s_2,y)\partial_y g(s_2,y)dy, \end{aligned}$$

and we get that $\int_{\mathbb{R}} yg(1-s_2,y)\partial_y g(s_2,y)dy = -(4\pi)^{-1/2}(1-s_2)$. Thus Part i) follows from this and (4.4).
b) Applying (4.3) with $z=x$ and $t=1-s_1$ we find that

$$\begin{aligned} I_{\alpha,\beta}(s_1,s_2) &= -2(1-s_1)\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} x^{\alpha-1}y^{\beta}\partial_x g(1-s_1,x)g(s_1-s_2,x-y)g(s_2,y)dxdy \\ &= 2(\alpha-1)(1-s_1)\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} x^{\alpha-2}y^{\beta} g(1-s_1,x)g(s_1-s_2,x-y)g(s_2,y)dxdy \\ &\quad -\frac{2(1-s_1)}{2(s_1-s_2)}\int_{\mathbb{R}}\int_{\mathbb{R}} x^{\alpha-1}y^{\beta}(x-y) g(1-s_1,x)g(s_1-s_2,x-y)g(s_2,y)dxdy, \end{aligned}$$

by integrating by parts wrt x, so we get

$$(1-s_2)I_{\alpha,\beta}(s_1,s_2) = 2(\alpha-1)(1-s_1)(s_1-s_2)I_{\alpha-2,\beta}(s_1,s_2) + (1-s_1)I_{\alpha-1,\beta+1}(s_1,s_2). \tag{4.5}$$

Doing the same with $z=y$ and $t=s_2$ we obtain that

$$s_1 I_{\alpha,\beta}(s_1,s_2) = 2(\beta-1)(s_1-s_2)s_2 I_{\alpha,\beta-2}(s_1,s_2) + s_2 I_{\alpha+1,\beta-1}(s_1,s_2). \tag{4.6}$$

Thus, upon successively substituting $(\alpha-1,\beta+1)$ and $(\alpha-2,\beta)$ for (α,β) in (4.6), we find that

$$s_1 I_{\alpha-1,\beta+1}(s_1,s_2) = 2\beta s_2(s_1-s_2)I_{\alpha-1,\beta-1}(s_1,s_2) + s_2 I_{\alpha,\beta}(s_1,s_2) \tag{4.7}$$

and

$$s_1 I_{\alpha-2,\beta}(s_1,s_2) = 2(\beta-1)(s_1-s_2)I_{\alpha-2,\beta-2}(s_1,s_2) + s_2 I_{\alpha-1,\beta-1}(s_1,s_2). \tag{4.8}$$

Plugging (4.7)-(4.8) in (4.5) we end up getting part ii). Further we obtain part iii) by following the same lines as in the derivation of part ii), and part iv) is a direct consequence of parts ii) and iii).
c) Arguing as in the derivation of part i) in a), we establish for any $\alpha \geq 2$ that

$$I_{\alpha,0}(s_1,s_2) = 2(\alpha-1)s_1(1-s_1)I_{\alpha-2,0}(s_1,s_2).$$

This and the obvious identity $I_{0,0}(s_1,s_2) = (4\pi)^{-1/2}$ yields part v) upon proceeding by induction on α. Finally, part vi) follows from part v) upon noticing from (4.2) that $I_{0,\alpha}(s_1,s_2) = I_{\alpha,0}(1-s_2,1-s_1)$. ☐

Further, for all $\alpha = (\alpha_k)_{1\leq k\leq n}$ and $\beta = (\beta_k)_{1\leq k\leq n}$ in $\mathbb{N}^n$, we put

$$\mathscr{I}(\alpha,\beta) = \int_0^1\int_0^{s_1}\left(\int_{\mathbb{R}^n}\int_{\mathbb{R}^n} x^{\alpha}y^{\beta}G(1-s_1,x)G(s_1-s_2,x-y)G(s_2,y)dxdy\right)ds_1 ds_2, \tag{4.9}$$

and establish the:

Lemma 4.3. *For each $\alpha = (\alpha_k)_{1\leq k\leq n}$ and $\beta = (\beta_k)_{1\leq k\leq n}$ in $\mathbb{N}^n$ we have:*

i) $\mathscr{I}(\alpha,\beta) = \int_0^1\int_0^{s_1}\prod_{k=1}^n I_{\alpha_k,\beta_k}(s_1,s_2)ds_1 ds_2$.
ii) $\mathscr{J}(\alpha,\beta) = \mathscr{J}(\beta,\alpha)$.
iii) $\mathscr{J}(\alpha,\beta) = 0$ *if any of the sums $\alpha_k+\beta_k$ for $1\leq k\leq n$, is odd.*

Proof. Part i) follows readily from the identity $G(s,z) = \prod_{k=1}^n g(s,z_k)$ arising from (2.15) for all $s \in \mathbb{R}^*$ and all $z = (z_k)_{1\leq k\leq n} \in \mathbb{R}^n$, and from the very definitions (4.2) and (4.9). Next, part ii) is a direct consequence of the first assertion of Lemma 4.1, while part iii) follows from the third point of Lemma 4.1. ☐

5. Proof of Theorem 1.1

We start by establishing two identities which are useful for the proof of Theorem 1.1.

5.1. **Two useful identities.** They are collected in the following:

Proposition 5.1. *Let $V \in C_0^\infty(\Omega)$ be real-valued and assume that $\mathbf{a} = \mathbf{I}$. Then, with reference to the definitions* (3.9)-(3.10)*, we have*

$$(4\pi)^{n/2} \sum_{|\alpha^2|=2} c_{\alpha^2} P_{\alpha^2}(V) = -\frac{1}{12} \int_\Omega |\nabla V|^2 dx \tag{5.1}$$

and

$$(4\pi)^{n/2} \sum_{|\alpha^2|=4} c_{\alpha^2} P_{\alpha^2}(V) = \frac{1}{120} \sum_k \int_\Omega \left(\partial_{kk}^2 V\right)^2 dx + \frac{13}{360} \sum_{k\neq \ell} \int_\Omega \left(\partial_{k\ell}^2 V\right)^2 dx. \tag{5.2}$$

Proof. Since

$$c_{\alpha^2} = \frac{\mathscr{I}(\alpha_1^2, \alpha_2^2)}{\alpha^2!},\ \alpha^2 = (\alpha_1^2, \alpha_2^2), \tag{5.3}$$

by (3.8) and (4.9), we know from the two last points in Lemma 4.3 that

$$c_{\alpha^2} = 0 \text{ if the sum } (\alpha_1^2)_k + (\alpha_2^2)_k \text{ is odd for any } k \in \{1, \ldots, n\}, \tag{5.4}$$

and

$$c_{\alpha^2} = c_{\widetilde{\alpha}^2} \text{ for } \widetilde{\alpha}^2 = (\alpha_2^2, \alpha_1^2). \tag{5.5}$$

We first compute $\sum_{|\alpha^2|=4} c_{\alpha^2} P_{\alpha^2}(V)$. In what follows we note $(0, \ldots, \underset{k}{\beta}, \ldots, 0)$, $1 \leq k \leq n$, $\beta \in \mathbb{R}$, the vector $(\beta_j)_{1\leq j\leq n} \in \mathbb{R}^n$ such that $\beta_j = 0$ for all $1 \leq j \neq k \leq n$ and $\beta_k = \beta$. In view of (5.3) we apply the first point in Lemma 4.3 for $\alpha^2 = ((0, \ldots \underset{k}{2}, \ldots 0), (0, \ldots, 0))$, $1 \leq k \leq n$, getting

(5.6)

$$c_{\alpha^2} = \int_0^1 \int_0^{s_1} I_{0,0}(s_1, s_2)^{n-1} I_{2,0}(s_1, s_2) ds_1 ds_2 = \frac{(4\pi)^{-(n-1)/2}}{2} \int_0^1 \int_0^{s_1} I_{2,0}(s_1, s_2) ds_1 ds_2 = \frac{(4\pi)^{-n/2}}{12},$$

with the aid of part v) in Lemma 4.2. Similarly, for $\alpha^2 = ((0, \ldots, \underset{k}{1}, \ldots, 0), (0, \ldots, \underset{k}{1}, \ldots, 0))$, $1 \leq k \leq n$, we use the first part of Lemma 4.2 and obtain that

$$c_{\alpha^2} = (4\pi)^{-(n-1)/2} \int_0^1 \int_0^{s_1} I_{1,1}(s_1, s_2) ds_1 ds_2 = \frac{(4\pi)^{-n/2}}{12}. \tag{5.7}$$

In light of (5.4)-(5.5) we deduce from (5.6)-(5.7) that

$$\sum_{|\alpha^2|=2} c_{\alpha^2} P_{\alpha^2}(V) = \frac{1}{6}(4\pi)^{-n/2} \int_\Omega \Delta V V dx + \frac{1}{12}(4\pi)^{-n/2} \int_\Omega |\nabla V|^2 dx.$$

Taking into account that $\int_\Omega \Delta V V dx = -\int_\Omega |\nabla V|^2 dx$, we obtain (5.1) from the above line.

We now compute $\sum_{|\alpha^2|=4} c_{\alpha^2} P_{\alpha^2}(V)$. As a preamble we first invoke Lemma 4.2 and get simultaneously

$$I_{2,2}(s_1, s_2) = 2(1 - s_1)[s_1 I_{0,2}(s_1, s_2) + 2s_2 I_{1,1}(s_1, s_2)] = 4(4\pi)^{-1/2}(1 - s_1)s_2[s_1(1 - s_2) + 2(1 - s_1)s_2], \tag{5.8}$$

and

$$I_{3,1}(s_1, s_2) = 2(1 - s_1)[2s_1 I_{1,1}(s_1, s_2) + s_2 I_{2,0}(s_1, s_2)] = 12(4\pi)^{-1/2}(1 - s_1)^2 s_1 s_2, \tag{5.9}$$

from part iii), and

$$I_{4,0}(s_1, s_2) = 12(4\pi)^{-1/2} s_1^2 (1 - s_1)^2, \tag{5.10}$$

from part v). Thus, for all $k \in \{1, \ldots, n\}$ it follows from the first part of Lemma 4.3 and (5.10) upon taking $\alpha^2 = ((0, \ldots, \underset{k}{4}, \ldots, 0), (0, \ldots, 0))$ in (5.3) that

$$c_{\alpha^2} = \frac{(4\pi)^{-(n-1)/2}}{4!} \int_0^1 \int_0^{s_1} I_{4,0}(s_1, s_2) ds_1 ds_2 = \frac{1}{120}(4\pi)^{-n/2}. \tag{5.11}$$

Further, choosing $\alpha^2 = ((0,\ldots,\underset{k}{3},\ldots,0),(0,\ldots,\underset{k}{1},\ldots,0))$ we deduce in the same way from (5.9) that,

$$c_{\alpha^2} = \frac{(4\pi)^{-(n-1)/2}}{3!}\int_0^1\int_0^{s_1} I_{3,1}(s_1,s_2)ds_1ds_2 = \frac{1}{60}(4\pi)^{-n/2}, \tag{5.12}$$

and with $\alpha^2 = ((0,\ldots,\underset{k}{2},\ldots,0),(0,\ldots,\underset{k}{2},\ldots,0))$, we get from (5.8) that

$$c_{\alpha^2} = \frac{(4\pi)^{-(n-1)/2}}{2!2!}\int_0^1\int_0^{s_1} I_{2,2}(s_1,s_2)ds_1ds_2 = \frac{1}{40}(4\pi)^{-n/2}. \tag{5.13}$$

Finally, upon taking $\alpha^2 = ((0,\ldots,\underset{k}{2},\ldots,0),(0,\ldots,\underset{\ell}{2},\ldots,0))$ in (5.3), for $1 \leq k \neq \ell \leq n$, we derive from the two last parts of Lemma 4.2 that

$$c_{\alpha^2} = \frac{(4\pi)^{-(n-2)/2}}{2!2!}\int_0^1\int_0^{s_1} I_{2,0}(s_1,s_2)I_{0,2}(s_1,s_2)ds_1ds_2 = \frac{1}{72}(4\pi)^{-n/2}, \tag{5.14}$$

while the choice $\alpha^2 = ((0,\ldots,\underset{k}{1},\ldots,\underset{\ell}{1},\ldots 0),(0,\ldots,\underset{k}{1},\ldots,\underset{\ell}{1},\ldots,0))$ leads to

$$c_{\alpha^2} = (4\pi)^{-(n-2)/2}\int_0^1\int_0^{s_1} I_{1,1}(s_1,s_2)^2ds_1ds_2 = \frac{1}{45}(4\pi)^{-n/2}, \tag{5.15}$$

with the aid of the first part. Putting (5.11)–(5.15) together and recalling (5.4)-(5.5) we end up getting (5.2). □

Armed with Proposition 5.1 we are now in position to prove Theorem 1.1.

5.2. **Completion of the proof.** By applying the reproducing property (2.5) to the kernel G, defined in (2.15), we derive from (3.8) for all $j \geq 1$ that

$$c_{\alpha^j=0} = \int_{(\mathbb{R}^n)^n}\int_0^1\int_0^{s_1}\cdots\int_0^{s_{j-1}} G(1-s_1,w_1)\prod_{k=1}^{j} G(s_k-s_{k+1},w_k-w_{k+1})dw^jds^j = \frac{(4\pi)^{-n/2}}{j!}, \tag{5.16}$$

where $s_{j+1} = w_{j+1} = 0$. In light of (3.10), (5.16) then yields that

$$\mathcal{P}_2(V) = -c_{\alpha^1=0}P_{\alpha^1=0}(V) = -(4\pi)^{-n/2}\int_\Omega V dx. \tag{5.17}$$

Next, bearing in mind that the potential V is compactly supported in Ω, we notice from (3.9) that

$$P_{\alpha^1}(V) = \int_\Omega \partial^{\alpha^1}V(x)dx = 0,\ |\alpha^1| \geq 1. \tag{5.18}$$

As a consequence we have

$$\mathcal{P}_4(V) = c_{\alpha^2=0}P_{\alpha^2=0}(V) - \sum_{|\alpha^1|=2} c_{\alpha^1}P_{\alpha^1}(V) = \frac{(4\pi)^{-n/2}}{2}\int_\Omega V(x)^2dx. \tag{5.19}$$

Further, as $\mathcal{P}_6 = -c_{\alpha^3=0}P_{\alpha^3=0}(V) + \sum_{|\alpha^2|=2} c_{\alpha^2}P_{\alpha^2}(V) - \sum_{|\alpha^1|=4} c_{\alpha^1}P_{\alpha^1}(V)$, it follows from (5.1) and (5.16) that

$$\mathcal{P}_6(V) = -\frac{(4\pi)^{-n/2}}{6}\left(\frac{1}{2}\int_\Omega |\nabla V(x)|^2dx + \int_\Omega V(x)^2dx\right). \tag{5.20}$$

Finally, since $\int_\Omega \partial^2_{km}V(x)V(x)^2dx = -2\int_\Omega \partial_kV(x)\partial_mV(x)V(x)dx$ for all natural numbers $1 \leq k, m \leq n$, by integrating by parts, we see that there is a constant C_n depending only on n such that we have

$$\left|\sum_{|\alpha^3|=2} c_{\alpha^3}P_{\alpha^3}(V)\right| \leq C_n\|V\|_\infty\int_\Omega |\nabla V(x)|^2dx,$$

according to (3.9). This, together with the identity

$$\mathcal{P}_8(V) = c_{\alpha^4=0}P_{\alpha^4=0}(V) - \sum_{|\alpha^3|=2} c_{\alpha^3}P_{\alpha^3}(V) + \sum_{|\alpha^2|=4} c_{\alpha^2}P_{\alpha^2}(V) - \sum_{|\alpha^1|=6} c_{\alpha^1}P_{\alpha^1}(V),$$

arising from (3.10), and (5.2), (5.16), (5.18), then yield

$$\sum_{|\gamma|=2}\int_\Omega |\partial^\gamma V(x)|^2 dx + \int_\Omega V(x)^4 dx \le C_n' \left(|\mathcal{P}_8(V)| + \|V\|_\infty \int_\Omega |\nabla V(x)|^2 dx. \right), \tag{5.21}$$

for some constant $C_n' > 0$ depending only on n. In light of (5.20)-(5.21) the set $\mathrm{Is}(V_0) \cap \mathcal{B}$ is thus bounded in $H^2(\Omega)$ from Corollary 3.1.

Acknowledgement. We would like to thank the anonymous referees for their valuable remarks which enabled us to improve substantially an earlier version of this work.

References

[BB] R. Bañuelos and A. Sá Barreto, *On the heat trace of Schrödinger operators*, Commu. Part. Diff. Equat. 20 (11, 12) (1995), 2153-2164.

[BGKS] C. G. Beneventano, P. Gilkey, K. Kirsten and E. M. Santangelo, *Heat trace asymptotics and the Gauss-Bonnet theorem for general connections*, J. Phys. A 45 (37) (2012), 347010, 12 pp.

[BGM] M. Berger, P. Gauduchon and E. Mazet, *Le spectre d'une variété riemannienne*, Lect. Notes Math. 194, Springer-Verlag, Berlin, 1974.

[Br] J. Brüning, *On the compactness of isospectral potentials*, Commun. Part. Differ. Equat. 9 (7) (1984), 687-698.

[Ch] I. Chavel, *Eigenvalues in riemannian geometry*, Avademic Press, Orlando, 1984.

[Co] Y. Colin De Verdière, *Une formule de trace pour l'opérateur de Schrödinger dans* $\mathbb{R}^3$, Ann. Scient. ENS, série 4, 14 (1) (1981), 27-39.

[Co2] Y. Colin De Verdière, *Semiclassical trace formulas and heat expansions*, Anal. PDE 3 (2012), 693703.

[GPS] C. G. Cordon, P. Perry and D. Schueth, *Isospectral and isoscattering manifolds: a survey of techniques and examples. Geometry, spectral theory, groups, and dynamics*, 157179, Contemp. Math. 387, Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2005.

[Da] E. B. Davies, *Heat kernels and spectral theory*, Cambridge Tracts in Math. 92, Cambridge University Press, London, 1989.

[Dod] J. Dodziuk, *Eigenvalues of the laplacian and the heat equation*, Am. Math. Mon. 9 (1981), 686-695.

[Don] H. Donnelly, *Compactness of isospectral potentials*, Trans. American Math. Soc. 357 (5) (2004), 1717-1730.

[DGGW] E. B. Dryden, C. S. Gordon, S. J. Greenwald and D. L. Webb, *Asymptotic expansion of the heat kernel for orbifolds*, Michigan Math. J. 56 (1) (2008), 205238.

[EnNa1] K.-J. Engel and R. Nagel, *One parameter semigroups for linear evolution equations*, Springer-Verlag, Berlin, 2000.

[EnNa2] K.-J. Engel and R. Nagel, *A short course on operator semigroups*, Springer-Verlag, Berlin, 2006.

[FS] E. Fabes and D. W. Stroock, *A new proof of Moser's parabolic Harnack inequality using the old ideas of Nash*, Arch. Rat. Mech. Anal. 96 (1986), 327-338.

[Fr] A. Friedman, *Partial differential equations of parabolic type*, Englwood Cliffs NJ, Prentice-Hall, 1964.

[Gi1] P. B. Gilkey, *Recursion relations and the asymptotic behavior of the eigenvalues of the laplacian*, Compositio Math. 38 (2) (1979), 201-240.

[Gi2] P. B. Gilkey, *Asymptotic formulae in spectral geometry*, Chapman and Hall/CRC, Boca Raton, 2004.

[Ho] H. Hochstadt, *Integral equations*, Wiley, NY, 1971.

[Ka] M. Kac, *Can one hear the shape of a drum ?*, Amer. Math. Monthly 73 (1964), 1-23.

[Kat] T. Kato, *Perturbation theory of linear operators*, 2nd edition, Springer-Verlag, Berlin, 1976.

[Kav] O. Kavian, *Introduction à la théorie des points critiques*, Smai-Springer, Paris, 1993.

[MS] H. P. McKean Jr. and I. M. Singer, *Curvature and the eigenvalues of the laplacian*, J. Diff. Geometry 1 (1967), 43-69.

[Mi] S. Minakshisudaram, *A generalization of Epstein zeta function*, Can. J. Math 1 (1949), 320-327.

[MP] S. Minakshisudaram and Å. Pleijel, *Some properties of the eigenfunctions of the Laplace-operator on riemannian manifolds*, Can. J. Math 1 (1949), 242-256.

[Ou] E. M. Ouhabaz, *Analysis of heat equations on domains*, London Math. Soc. Monographs, vol. 31, Princeton University Press 2004.

[RS2] M. Reed, B. Simon, *Methods of Modern Mathematical Physics IV: Analysis of Operators*, Academic Press, 1978.

[SV] D. W. Stroock and S. R. S. Varadhan, *Multidimensional diffusion processes*, Classics in Mathematics, Springer-Verlag, Reprint from 1997 Edition, 2006.

[We] H. Weyl, *A supplementary note to "A generalization of Epstein zeta function"*, Can. J. Math 1 (1949), 326-327.

[Wi] D. V. Widder, An introduction to transform theory, Academic Press, New York, 1971.

§Institut Élie Cartan de Lorraine, UMR CNRS 7502, Université de Lorraine, B.P. 70239, 54506 Vandoeuvre-lès-Nancy Cedex, France
E-mail address: mourad.choulli@univ-lorraine.fr

¶Institut Élie Cartan de Lorraine, UMR CNRS 7502, Université de Lorraine, B.P. 70239, 54506 Vandoeuvre-lès-Nancy Cedex, France
E-mail address: laurent.kayser@univ-lorraine.fr

†Aix-Marseille Université, CNRS, CPT UMR 7332, 13288 Marseille, France & Université de Toulon, CNRS, CPT UMR 7332, 83957 La Garde, France
E-mail address: yavar.kian@univ-amu.fr

‡Aix-Marseille Université, CNRS, CPT UMR 7332, 13288 Marseille, France & Université de Toulon, CNRS, CPT UMR 7332, 83957 La Garde, France
E-mail address: eric.soccorsi@univ-amu.fr

Résumé

Nous revisitons la méthode classique des paramétrices pour en déduire une minoration et une majoration gaussiennes, pour la solution fondamentale d'un opérateur parabolique général sous forme non divergentielle. Nous utilisons ensuite le fait que la fonction de Neumann Green, d'un opérateur parabolique général sur un ouvert borné régulier, peut être construite comme somme de la solution fondamentale et d'une intégrale de type simple couche parabolique pour établir une minoration gaussienne pour cette fonction de Neumann Green. Le point clef de la preuve réside dans l'effet régularisant, en temps, de l'intégrale de type simple couche. Nous démontrons aussi que cette approche peut être adaptée pour démontrer une minoration gaussienne pour la fonction de Green-Neumann correspondante à l'opérateur de Laplace-Beltrami sur un ouvert régulier d'une variété riemannienne compacte sans bord.

Nous démontrons ensuite une nouvelle majoration gaussienne pour la fonction de Neumann Green correspondante à l'opérateur de Laplace-Beltrami sur un ouvert Lipschitz d'une variété riemannienne complète. L'intérêt de cette nouvelle majoration est qu'elle ne contient pas le terme habituel d'une exponentielle en temps.

Finalement, comme application de estimations gaussiennes, nous donnons un résultat de compacité des potentiels isospectraux en relation avec une formule asymptotique pour les noyaux de la chaleur.

Mots-clés: opérateur parabolique, solution fondamentale, fonction de Neumann Green, noyau de la chaleur.

Abstract

We revisit the parametrix method in order to obtain a gaussian two-sided bounds for the fundamental solution of a general parabolic operator which is not in a divergence form. Then we use the fact that the Neumann Green function of a general parabolic operator on a regular bounded domain can be constructed as a perturbation of the fundamental solution by a simple-layer potential in order to establish a Gaussian lower bound for this Neumann Green function. The key point of the proof lies in the time-regularising effect of the single-layer potential. We also prove that this method can be adapted to get a lower Gaussian bound for the Neumann heat kernel of the Laplace-Beltrami operator on an open subset of a compact Riemannian manifold.

In a second part, we prove a new Gaussian upper bound for the Neumann heat kernel of the Laplace-Beltrami operator on a Lipschitz domain of a complete Riemannian manifold. The principal interest of this new upper bound is that we do not have the usual exponentiel terme in time in this upper bound.

In a last part, as an application of the Gaussian estimates, we give a compactness result of isospectral potentials which is in relation to an asymptotic formule for the heat kernels.

Keywords: parabolic operator, fundamental solution, Neumann Green function, heat kernel.