

RECHERCHE COOPÉRATIVE SUR PROGRAMME N° 25

BERNARD GAVEAU

Théorèmes de comparaison pour les opérateurs elliptiques en mécanique quantique et en géométrie

Les rencontres physiciens-mathématiciens de Strasbourg - RCP25, 1979, tome 27
« Conférences de : W.O. Amrein, H. Brezis, T. Damour, R. Flume, B. Gaveau et I. Ekeland », , exp. n° 5, p. 54-62

http://www.numdam.org/item?id=RCP25_1979__27__54_0

© Université Louis Pasteur (Strasbourg), 1979, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la série « Recherche Coopérative sur Programme n° 25 » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (<http://www.numdam.org/conditions>). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

NUMDAM

Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
<http://www.numdam.org/>

Théorèmes de comparaison pour les opérateurs
elliptiques en mécanique quantique et en géométrie

par

Bernard GAVEAU

Département de Mathématiques - Université de Paris VI

1. Le but de cet exposé est de discuter quelques applications de théorèmes de comparaison à la mécanique quantique et la géométrie, en particulier comparaison de solutions fondamentales d'équations elliptiques ou paraboliques. Les théorèmes de comparaison sont souvent utilisés pour comparer les solutions de deux équations différentielles ordinaires lorsqu'on a une inégalité entre les coefficients. En théorie des équations aux dérivées partielles, un théorème de comparaison élémentaire est le suivant : si D_1 et D_2 sont deux domaines tels que D_1 contienne D_2 , alors la fonction de Green de D_1 est plus grande que celle de D_2 , ce qui résulte facilement du principe du maximum. De même le principe de Carleman donne un théorème de comparaison pour les mesures harmoniques de deux domaines emboîtés qui ont une partie de leur frontière en commun.

2. Considérons d'abord le problème de l'estimée asymptotique des valeurs propres du laplacien sur un domaine de \mathbb{R}^n ; soit D un domaine de \mathbb{R}^n borné. Considérons l'équation aux valeurs propres

$$(1) \quad \begin{aligned} \frac{1}{2} \Delta u + \lambda u &= 0 \quad \text{sur } D \\ u &= 0 \quad \text{sur } \partial D \end{aligned}$$

Il existe une suite $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n \leq \dots$ croissante de valeurs

propres avec $\lambda_n \rightarrow +\infty$. Le théorème classique de H. Weyl nous donne

$$(2) \quad \#(\lambda_n \text{ avec } \lambda_n \leq \lambda) \sim \text{Vol } D \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^{n/2} \quad \text{si } \lambda \rightarrow +\infty$$

Nous allons en donner la démonstration très simple inventée par M. Kac (Voir [1]). D'après un théorème taubérien, il est équivalent de montrer que

$$(3) \quad \sum_n e^{-\lambda_n t} \sim \frac{\text{Vol } D}{(2\pi t)^{n/2}} \quad \text{si } t \rightarrow 0^+.$$

La somme de droite apparaît comme la trace du noyau de la chaleur $p_t^{(D)}(x,y)$, c'est-à-dire la trace de la solution fondamentale de l'équation

$$(4) \quad \begin{aligned} \frac{\partial p_t^{(D)}(x,y)}{\partial t} &= \frac{1}{2} \Delta_y p_t^{(D)}(x,y) \\ p_t^{(D)}(x,y) &\rightarrow \delta(x-y) \quad \text{si } t \rightarrow 0^+ \\ p_t^{(D)}(x,y) &= 0 \quad \text{si } y \in \partial D \end{aligned}$$

En effet $p_t^{(D)}(x,y) = \sum_n e^{-\lambda_n t} \varphi_n(x) \varphi_n(y)$ où φ_n est solution de (1) telle que $\int_D \varphi_n^2(x) dx = 1$.

Dans ce cas, on a alors

$$(5) \quad \int_D p_t^{(D)}(x,x) dx = \sum_n e^{-\lambda_n t} \int_D \varphi_n^2(x) dx = \sum_n e^{-\lambda_n t}.$$

Considérons alors l'interprétation probabiliste du noyau de la chaleur; par définition, le mouvement brownien $b_\omega(t)$ de \mathbb{R}^n est un processus stochastique tel que $b_\omega(0) = 0$, tel que les accroissements successifs soient indépendants et l'accroissement $b_\omega(t) - b_\omega(s)$ ($t > s$) ait la loi

$$(6) \quad \frac{\exp\left(-\frac{|x|^2}{2(t-s)}\right)}{(2\pi(t-s))^{n/2}} \equiv p_{t-s}^{(\mathbb{R}^n)}(x)$$

$p_t(x)$ est la solution fondamentale de l'équation de la chaleur dans tout l'espace. On obtient la solution fondamentale de l'équation de la chaleur dans le domaine D , par la formule probabiliste.

$$(7) \quad p_t^{(D)}(x,y)dy = \text{Prob} (x + b_\omega(t) \in dy \text{ si } t < T_D(\omega))$$

où $T_D(\omega)$ est le premier temps t tel que $x + b_\omega(T_D(\omega)) \notin D$. (premier temps de sortie).

Si $D' \subset D$; il est clair que $T_{D'} \leq T_D$ et il résulte donc de (7) que

$$(8) \quad p_t^{D'}(x,y) \leq p_t^{(D)}(x,y) .$$

Prenons pour D' un cube de centre x contenu dans D : on a alors

$$(9) \quad p_t^{(D')}(x,y) \leq p_t^{(D)}(x,y) \leq p_t^{(R^n)}(x,y) .$$

L'avantage de prendre pour D' un cube est que l'on peut calculer explicitement les fonctions propres et valeurs propres de Δ dans D' parce que les variables se séparent; par conséquent, on peut calculer $p_t^{(D')}(x,y)$.

On a donc d'après (5), (6) et (9)

$$(10) \quad \int_{D'} p_t^{(D')}(x,x) dx \leq \sum_n e^{-\lambda_n t} \leq \int_D \frac{1}{(2\pi t)^{n/2}} dx = \frac{\text{Vol } D}{(2\pi t)^{n/2}}$$

Cette estimée et le calcul explicite de $p_t^{(D')}$ suffit à démontrer le comportement asymptotique (3) (voir [1],[2]).

3. Nous allons maintenant comparer plutôt les premières valeurs propres dans une situation de géométrie riemannienne. Considérons une variété riemannienne V et x_0 un point de V . Considérons une boule géodésique $B(x_0, r)$ de centre x_0 et de rayon r assez petit pour que l'application exponentielle de centre x_0 soit une carte de $T_{x_0}(V)$ sur $B(x_0, r)$. ($T_{x_0}(V)$ est l'espace tangent à V en x_0).

Nous nous intéressons toujours au problème suivant

$$(II) \quad \begin{aligned} \frac{1}{2} \Delta \Psi &= \lambda \Psi \text{ sur } B(x_0, r) \\ \Psi &= 0 \text{ sur } \partial B(x_0, r) \end{aligned}$$

où Δ est ici le laplacien riemannien de V .

Mais cette fois-ci nous voulons plutôt regarder la plus grande valeur propre λ_1 de (II). Nous allons obtenir cette plus grande valeur propre en étudiant toujours le noyau de la chaleur $p_t(x, y)$ de $B(x_0, r)$, c'est-à-dire

$$(12) \quad \begin{aligned} \frac{1}{2} \Delta p_t(x, y) &= \frac{\partial}{\partial t} p_t(x, y) \text{ dans } B(x_0, r) \\ p_t(x, y) &\rightarrow \delta(x, y) \text{ si } t \rightarrow 0 \\ p_t(x, y) &= 0 \text{ sur } \partial B(x_0, r) \end{aligned}$$

p_t est toujours relié aux fonctions propres et aux valeurs propres de (11) par la formule standard :

$$(13) \quad p_t(x, y) = \sum e^{-\lambda_n t} \varphi_n(x) \varphi_n(y)$$

et l'on voit que λ_1 est détecté par le comportement de $p_t(x, y)$ si $t \rightarrow +\infty$.

Notons K la courbure sectionnelle de V et supposons que $K \leq a^0$ où a est une constante. Considérons la variété V^a de courbure constante a et soit $x^{(a)} \in V^a$ et $B^{(a)}(x^{(a)}, r)$ la boule géodésique de centre $x^{(a)}$ et de rayon r et $p_t^{(a)}(x, y)$ le noyau de la chaleur relatif à cette boule (pour le laplacien $\Delta^{(a)}$). Nous pouvons alors identifier canoniquement, par les cartes exponentielles, les boules $B(x_0, r)$ et $B^{(a)}(x^{(a)}, r)$ de sorte que x_0 s'identifie à $x^{(a)}$. Nous allons montrer que si $y^{(a)}$ est le point correspondant à y par cette identification, alors

$$(14) \quad p_t(x_0, y) \leq p_t^{(a)}(x^{(a)}, y^{(a)})$$

d'où nous déduirons que $\lambda_1^{(a)} \leq \lambda_1$ si $\lambda_1^{(a)}$ **est la plus grande valeur propre**

de $\frac{1}{2}\Delta^{(a)}$ sur $B^{(a)}(x^{(a)}, r)$. ($\lambda_1^{(a)}$ se calcule comme zéro de fonctions spéciales).

Pour cela, nous utilisons l'interprétation probabiliste de noyau de la chaleur;

il existe sur V et $V^{(a)}$ des processus de diffusion $X_\omega(t)$ et $X_\omega^{(a)}(t)$ tel que

$$P_t(x_0, y) dy = \text{Prob}(X_\omega(t) \in dy, t < T_r | X_\omega(0) = x_0)$$

$$P_t^{(a)}(x_0^{(a)}, y^{(a)}) dy^{(a)} = \text{Prob}(X_\omega^{(a)}(t) \in dy^{(a)}, t < T_r^{(a)} | X_\omega^{(a)}(0) = x_0^{(a)})$$

où T_r et $T_r^{(a)}$ sont les premiers temps de sortie de X_ω et $X_\omega^{(a)}$ hors de $B(x_0, r)$ et $B^{(a)}(x^{(a)}, r)$.

Par symétrie (ou réflexion du temps) on peut écrire encore

$$(15) \quad P_t(x_0, y) dx_0 = \text{Prob}(X_\omega(t) \in dx_0, t < T_r | X_\omega(0) = y)$$

$$P_t^{(a)}(x^{(a)}, y^{(a)}) dx^{(a)} = \text{Prob}(X_\omega^{(a)}(t) \in dx^{(a)}, t < T_r^{(a)} | X_\omega^{(a)}(0) = y^{(a)})$$

Maintenant $X_\omega(t)$ et $X_\omega^{(a)}(t)$ sont données par des solutions d'équations différentielles stochastiques (voir Mc Kean [3])

$$(16) \quad dr(X_\omega(t)) = db_\omega(t) + \frac{H'}{H}(X_\omega(t)) dt$$

$$d(r^{(a)}(X_\omega^{(a)}(t))) = db_\omega'(t) + \left(\frac{H^{(a)'}}{H^{(a)}} \right) (X_\omega^{(a)}(t)) dt .$$

où $b_\omega(t)$ et $b_\omega'(t)$ sont des browniens réels et H est l'élément de volume en coordonnées polaires géodérique de centre x_0 et $r(x)$ est la distance riemannienne de x à x_0 . (notations analogues dans $V^{(a)}$). L'hypothèse de courbure $K \leq a$, nous apprend que $\frac{H'}{H} \geq \frac{(H^{(a)'})'}{H^{(a)}}$.

D'après le principe de comparaison des solutions d'équations différentielles stochastiques dû à P. Malliavin ([4] et [5]) cela implique que

$$(17) \quad r(X_\omega(t)) \geq r^{(a)}(X_\omega^{(a)}(t))$$

(sachant que $r(X_\omega(0)) = r(y) = r(y^{(a)}) = r^{(a)}(X_\omega^{(a)}(0))$) la notation " \geq " signifie que l'inégalité (17) n'a pas lieu trajectoire par trajectoire (parce que

les mouvements browniens figurant dans (16) sont distincts), mais seulement en loi. Compte-tenu de (15), il est alors facile d'obtenir l'estimée (14) (voir [6] pour les détails de la démonstration, et d'autres applications). En particulier intégrant (14) par rapport à t , on déduit la comparaison des noyaux de Green des boules

$$g(x_0, y) \leq g^{(a)}(x^{(a)}, y^{(a)}) .$$

$g^{(a)}(x^{(a)}, y^{(a)})$ peut se calculer explicitement.

4. Donnons maintenant quelques applications en mécanique quantique.

Considérons un système quantique à n degrés de liberté ($n \geq 3$) dont l'énergie est quantifiée sous la forme

$$(18) \quad \frac{1}{2}\Delta - V$$

où Δ est le laplacien usuel de \mathbb{R}^n et V est le potentiel d'interaction, i.e une fonction mesurable sur \mathbb{R}^n dont nous notons

$$V = V^+ - V^-$$

la décomposition en parties positives et négatives. Nous nous intéressons ici toujours au problème des valeurs propres

$$(19) \quad - (\frac{1}{2}\Delta - V) \Psi = \lambda \Psi$$

où Ψ est une fonction de la classe $L^2(\mathbb{R}^n)$.

En général, l'étude de (19) se fait en introduisant une extension auto adjointe H fixée de $\frac{1}{2}\Delta - V$ et on étudie alors le spectre de cette extension H , i.e l'équation (19) lorsque Ψ est dans le domaine de l'extension H . Souvent, l'extension utilisée est celle de Rayleigh-Ritz où H est obtenue à partir de la somme des formes quadratiques $\int |\nabla \Psi|^2 dx$ et $\int V \Psi^2 dx$ et alors la plus grande valeur propre est obtenue par la formule spectrale de Rayleigh-Ritz classique (voir par exemple [10]).

Une autre façon de procéder, consiste à introduire le semi-groupe de la chaleur de Feynman-Kac (voir [1],[7],[8],[9])

$$(20) \quad (P_t f)(x) = E(\exp(-\int_0^t V(X_\omega(s)+x)ds) f(X_\omega(t)+x) | X_\omega(0)=0) .$$

où $X_\omega(t)$ est le mouvement brownien standard de \mathbb{R}^n à condition, bien sûr, que l'intégrale figurant dans (20) converge. Lorsqu'il en est ainsi, P_t définit un semi groupe (ie $P_{t+s} = P_t \circ P_s$) dont le générateur infinitésimal H_1 est une extension autoadjointe de $\frac{1}{2}\Delta - V$. La borne supérieure λ_1 du spectre de H_1 est alors contrôlée par la formule de Kac ([1])

$$(21) \quad \lambda_1 \leq \frac{\log E(\exp(-\int_0^t V(X_\omega(s))ds) | X_\omega(0)=x)}{t}$$

On dit alors que le système n'a pas d'états liés dans l'extension de Feynman-Kac si $\lambda_1 \leq 0$.

La référence [7] donne un critère d'intégrabilité des fonctionnelles de Kac et donc du semi groupe P_t . Pour cela notons $g(x,y)$ la solution fondamentale de $\frac{1}{2}\Delta$ dans \mathbb{R}^n

$$(22) \quad \frac{1}{2}\Delta_y g(x,y) = \delta(x-y) .$$

Alors si $\max_{x \in \mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} g(x,y) V^-(y) dy \leq C < 1$ on a que $E_x(\exp(-\int_0^{+\infty} V(X_\omega(s))ds)) \leq \frac{1}{1-C}$.

Dans ces conditions, il en résulte que P_t est un semi groupe d'opérateurs continus de L^p dans L^p pour tout $1 \leq p \leq +\infty$ et que, de plus le système n'a pas d'états liés dans l'extension de Feynman-Kac.

En particulier, on retrouve des résultats classiques (toutefois avec de moins bonnes constantes de couplage en général) :

1) le résultat de Bargman, à savoir que si V est un potentiel à symétrie sphérique dans \mathbb{R}^3 décroissant tel que $\int_0^{+\infty} V^-(r)r dr < +\infty$, alors pour ϵ assez

petit ϵV n'a pas d'états liés (dans l'extension de Feynman-Kac)

2) le résultat de Kato : si $V^- \in L^p(\mathbb{R}^n) \cap L^r(\mathbb{R}^n)$ pour un $p < \frac{n}{2}$ et un $r > \frac{n}{2}$, alors pour ϵ assez petit ϵV n'a pas d'états liés (toujours dans l'extension de Feynman-Kac).

etc... (voir [7]).

Dans [8] est donné une amélioration du théorème de convergence de [7] et d'autres applications, en particulier aux fonctions propres.

5. Nous voyons que les résultats précédents concernent une extension autoadjointe fixée de $-\frac{1}{2}\Delta + V$. On peut se poser alors les questions suivantes :

1. Quel est le lien entre l'extension de Feynman-Kac définie par le semi groupe (20) et l'extension de Rayleigh-Ritz ou d'autres extensions ?
2. Peut-on donner un critère "absolu" d'absence d'états liés indépendamment de la donnée a priori d'une extension fixée de $-\frac{1}{2}\Delta + V$? C'est-à-dire, à quelles conditions l'équation

$$(23) \quad \left(-\frac{1}{2}\Delta + V\right) \Psi = \lambda \Psi$$

au sens des distributions avec Ψ dans $L^2(\mathbb{R}^n)$ implique-t-elle que λ est positif?

Une réponse fragmentaire à ces questions est exprimée dans [9] ; supposons pour cela que V soit localement borné (hypothèse vraisemblablement technique).

Alors si

$$(24) \quad \max_{x \in \mathbb{R}^n} \int_{\mathbb{R}^n} g(x,y) V^-(y) dy \leq \frac{1}{2},$$

l'équation (23) prise au sens des distributions entraîne automatiquement que λ est positif (absence absolue d'états liés) et que Ψ , la fonction propre, est dans le domaine de l'extension autoadjointe de Feynman-Kac, en fait, on a

$$(25) \quad P_t \Psi = e^{\lambda t} \Psi$$

La démonstration consiste à obtenir une formule de représentation intégrale de $\Psi(x)$ dans une boule de centre x et de rayon R et à montrer que les intégrales sur le bord de cette boule qui interviennent dans la formule intégrale tendent vers 0 si le rayon $R \rightarrow +\infty$; on obtient alors à la limite la formule (25).

Remarque : on trouvera à la fin de la référence [7] une application au cas où l'exponentielle de Kac converge par oscillation et dans l'article récent de J. Vauthier [11] des résultats sur la finitude de la dimension des espaces de fonctions propres satisfaisant certaines conditions de croissance généralisant des résultats analogues d'Agmon.

REFERENCES :

- [1] M. Kac : On some connections between probability and differential equations. Proceedings 2nd symposium de Berkeley (1950) on probability and statistics.
- [2] M. Kac : Can One hear the shape of a drum ? American Math Monthly 1964.
- [3] H.P. Mc Kean : Stochastic integrals Acad. Press (1969).
- [4] P. Malliavin : Green function on a riemannian manifold and stochastic integrals Proceedings Nat. Acad. Sc. USA 1974.
- [5] P. Malliavin : diffusion et géométrie différentielle globale CIME 1976.
- [6] A. Debiard, B. Gaveau, E. Mazet : Théorèmes de comparaison en géométrie riemannienne. Publ. Inst. Rech. Math. University of Kyoto 1976.
- [7] A.M. Berthier, B. Gaveau : Critère de convergence des fonctionnelles de Kac et applications en mécanique quantique et en géométrie. Journal of functional analysis 1978.
- [8] Carmona : point wise bound for Schrödinger operators (Journal of functional analysis à paraître).
- [9] B. Gaveau : Fonctions propres et non existence absolue d'états liés pour certains systèmes quantiques (A paraître Communications in Mathematical Physics).
- [10] V.Glaser, Gross, Martin, Thirring : symposium in honor of V Bargmann Princeton 1976.
- [11] J. Vauthier : à paraître.