

# Equations aux dérivées partielles

Claude BARDOS et Thierry PAUL\*

## Table des matières

<b>1</b>	<b>INTRODUCTION</b>	<b>4</b>
<b>2</b>	<b>Equations du premier ordre</b>	<b>6</b>
2.1	Equation et théorème de Liouville . . . . .	6
2.2	Intégration des équations de Hamilton-Jacobi . . . . .	8
2.3	Equation de Hamilton-Jacobi et contrôle optimal . . . . .	10
<b>3</b>	<b>La dynamique quantique</b>	<b>13</b>
3.1	L'équation de Schrödinger linéaire . . . . .	13
3.1.1	L'équation fondamentale . . . . .	13
3.1.2	Existence de la dynamique et analyse fonctionnelle . . . . .	14
3.1.3	Aspects spectraux et théorie de la diffusion . . . . .	16
3.2	L'approximation semiclassique . . . . .	19
3.2.1	Symboles et quantifications . . . . .	20
3.2.2	WKB, Hamilton-Jacobi et les caustiques . . . . .	21
3.2.3	États cohérents et équation de Hamilton . . . . .	23
3.2.4	Le théorème d'Egorov . . . . .	24
3.3	Théorie des perturbations et formes normales . . . . .	25
3.4	Formule des traces, ergodicité des fonctions propres . . . . .	28
3.5	Intégrale de Feynman . . . . .	31
3.6	Equation de Von Neumann et équation de Schrödinger non linéaire . . . . .	33
<b>4</b>	<b>Le Laplacien dans l'espace entier ou dans un domaine avec frontières</b>	<b>36</b>
4.1	Introduction au laplacien . . . . .	36

---

\*Professeur émérite, Laboratoire JLL, Université Pierre et Marie Curie, et CNRS, Centre de Mathématiques Laurent Schwartz, Ecole polytechnique

4.2	Le laplacien comme opérateur non borné . . . . .	37
<b>5</b>	<b>La formulation variationnelle</b>	<b>39</b>
5.1	introduction et formalisme . . . . .	39
5.2	Le théorème de Lax Milgram . . . . .	40
5.2.1	Conditions aux limites et inégalité de Poincaré . . . . .	41
5.3	Coefficients variables et peu réguliers . . . . .	42
5.3.1	Traitement de non-linéarité par interprétation . . . . .	42
5.3.2	Discrétisation . . . . .	44
<b>6</b>	<b>L'équation de la chaleur</b>	<b>45</b>
6.1	Introduction . . . . .	45
6.2	Application à la formule de Weyl avec le théorème taubérien . . . . .	47
6.3	La formule de Feynmann-Kac . . . . .	48
<b>7</b>	<b>L'équation des ondes</b>	<b>50</b>
7.1	Introduction . . . . .	50
7.2	Résultats Globaux . . . . .	50
7.3	Formules explicites . . . . .	52
7.4	Analyse à haute fréquence . . . . .	54
7.5	Application de l'analyse haute fréquence . . . . .	55
7.6	Propriétés spécifiques du problème extérieur et équation d'Helmholtz . . . . .	56
<b>8</b>	<b>Les équations de l'hydrodynamique</b>	<b>57</b>
8.1	Introduction . . . . .	57
8.2	L'équation d'Euler compressible et l'équation de Burger . . . . .	58
8.3	Les équations Navier Stokes et les équations d'Euler incompressibles . . . . .	61
8.4	Existence, unicité et stabilité de la solution de l'équation d'Euler ( $\nu = 0$ ) . . . . .	63
8.5	Existence, unicité et stabilité de la solution de l'équation de Navier-Stokes $\nu > 0$ . . . . .	64
8.6	Les modèles de Turbulence . . . . .	66
<b>9</b>	<b>La mécanique Moléculaire</b>	<b>67</b>
9.1	L'équation de Boltzmann . . . . .	67
9.2	De l'équation de Boltzmann aux équations hydrodynamiques . . . . .	72
9.3	Dérivation de l'équation d'Euler compressible . . . . .	72
9.4	Dérivation de l'équation de Navier-Stokes compressible . . . . .	73
9.5	Dérivation de l'équation de Navier-Stokes et d'Euler incompressibles . . . . .	74

9.6	Démonstrations rigoureuses de convergence . . . . .	74
<b>10</b>	<b>La dérivation des équations de champ moyen : Vlasov et Schrödinger non linéaire</b>	<b>75</b>
<b>11</b>	<b>L'équation de Kortweg et De Vries (KdV) et les systèmes intégrables</b>	<b>78</b>
11.1	Introduction . . . . .	78
11.2	La paire de Lax et la méthode de Gelfand-Levitan-Marchenko . . . . .	79
11.3	Intégrabilité de l'équation de KdV et systèmes Hamiltoniens en dimension infinie . . .	80
11.4	Généralisations . . . . .	81
<b>12</b>	<b>Les équations de l'élasticité</b>	<b>81</b>
12.1	Introduction . . . . .	81
12.2	Equations linéarisées et propriétés spécifiques . . . . .	82
12.3	Equation d'Euler Bernouilly et de Timoshenko . . . . .	84
<b>13</b>	<b>Conclusion</b>	<b>85</b>

# 1 INTRODUCTION

Il s'agit d'une théorie motivée par la description de phénomènes distribués. Il y a donc au moins une (et souvent plusieurs) variable(s) d'espace et le temps. Contrastant en cela avec la dynamique du point matériel élaborée par Newton et Leibniz dans la deuxième moitié du 17<sup>ème</sup> siècle, cette théorie a vu (probablement) le jour avec Euler et d'Alembert quelques 70 ans plus tard, et Laplace encore 40 ans après.

On parle d'équations d'évolution quand le temps est présent et d'équations stationnaires sinon. Comme pour les équations différentielles, les inconnues (solutions à trouver) ne sont pas uniquement des valeurs numériques mais des fonctions. Fonctions qui dépendent elles-mêmes de fonctions : par exemple pour des problèmes décrits dans des domaines différents de l'espace entier, les conditions aux limites, réalisées elles-mêmes par des fonctions définies sur le bord, jouent un rôle essentiel.

On peut plus ou moins classer les équations aux dérivées partielles (EDP) en catégories elliptique, parabolique et hyperbolique, mais cette classification, qui n'apparaîtra pas dans notre exposé, n'est vraiment rigoureuse que pour des équations linéaires à coefficients constants. Il nous semble préférable de garder à l'esprit qu'il existe des problèmes modèles (en petit nombre d'ailleurs) et que l'on attribue les mêmes noms aux équations qui leur ressemblent. Enfin il est important de remarquer que la richesse d'une équation correspond à la variété des domaines où elle s'applique.

C'est donc selon nous un trait particulier de la théorie qu'un *petit* nombre d'équations soit présent.

On peut se demander si'il y a une raison à cela. Il faut tout de suite remarquer que les EDP sont en quelque sorte couplées à une phénoménologie soit sous-jacente (modèles microscopiques ou autres), soit asymptotique (compatibilité avec modèle macroscopique), qui font que le véritable moteur de leur élaboration repose en général sur nombre de principes de symétries et conservations, qui perdurent d'un modèle à l'autre.

Naturellement on a tout d'abord cherché des solutions explicites (noyau de Poisson, de la chaleur, utilisation des transformées de Laplace et de Fourier...). Mais on s'est vite rendu compte que, encore plus que pour les équations différentielles ordinaires, les cas où les solutions s'écrivaient de manière explicite étaient exceptionnels. Néanmoins ces exemples demeurent instructifs, malgré deux nouveaux outils qui ont introduit des points de vue différents : d'une part l'émergence de l'analyse fonctionnelle qui fournit des informations sur l'existence, l'unicité et la stabilité de solutions sans qu'il soit besoin de recourir à leur calcul explicite, et d'autre part l'apparition des calculs sur ordinateurs qui, eux aussi, suppléent à l'absence d'information analytique.

Bien qu'Euler présentait, pour la mécanique des fluides, la notion de solution faible, c'est avec l'intégrale de Lebesgue et les distributions de Schwartz que les théorèmes de l'analyse fonctionnelle deviennent ici vraiment opérant.

Nous nous proposons de présenter des résultats modernes de la théorie, en généralisant entre autre les situations liminaires que sont les équations différentielles ordinaires et le calcul matriciel.

## Guide de lecture

Dans la Section 2 nous présentons en détail le cas d'une EDP qui généralise directement la théorie de Cauchy-Lipschitz. Le cas de la dynamique hamiltonienne sera d'ailleurs présent dans plusieurs sections, comme l'un des fils rouges de notre exposé.

La Section 3 présente l'équation de Schrödinger à la fois pour son intérêt propre et parce qu'elle a été historiquement un moteur pour le développement de l'analyse fonctionnelle.

Les Sections 4, 5 et 6 introduisent les opérateurs elliptiques et paraboliques les plus classiques, du second ordre, en vue de traiter de questions sensiblement plus macroscopiques.

L'équation des ondes, sujet de la Section 7, est l'archétype du système hyperbolique. Traitant de phénomènes ondulatoires, elle contient des asymptotismes à haute fréquence *algébriquement* équivalents à la limite semiclassique rencontrée dans la section 3.

Les Sections 8 et 9 concernent la mécanique des fluides : c'est l'exemple le plus général de système générant des singularités (ondes de chocs). De plus c'est le premier exemple historique de dérivation à partir de structures microscopiques, ainsi que de l'émergence d'une approche mathématique de l'entropie.

La Section 10 présente un point de vue différent : la condition de champ moyen préserve la réversibilité et par là-même empêche la production d'entropie.

Les deux dernières sections sont deux exemples, parmi d'autres, de démarches particulières visant à exhiber deux types de pathologies de solution. Ce sont deux entités importantes et modernes de la théorie.

## 2 Equations du premier ordre

### 2.1 Equation et théorème de Liouville

Un certain nombre de résultats de la théorie des équations différentielles ordinaires s'exportent systématiquement vers les équations aux dérivées partielles. Le théorème d'existence et d'unicité de Cauchy-Lipschitz devient le théorème de Cauchy-Kovalevski et par dualité conduit au théorème d'Holmgren.

Plutôt que ces énoncés généraux, basés (en ce qui concerne le théorème de Cauchy-Kovalevski) sur des hypothèses d'analyticité restrictives et très "instables", nous avons choisi de commencer par l'exemple le plus explicite et le plus naturel. Dans un cadre global, il contient déjà et de façon instructive, les principales idées présentes dans la suite de cet exposé et les applications qu'il permet de dériver sont multiples.

On considère donc dans  $\mathbf{R} \times \mathbf{R}^n$  un champ de vecteur

$$X(t, x) = (X_1(t, x), X_2(t, x), \dots, X_n(t, x)), \quad (t, x) \in \mathbf{R} \times \mathbf{R}^n$$

continu par rapport à  $t$  et uniformément lipschitzien par rapport à  $x$ . Ces hypothèses assurent que les solutions du système différentiel :

$$\dot{x}(t) := \frac{dx(t)}{dt} = X(t, x(t)), \quad x(t_0) = x_0 \quad (2.1)$$

sont bien définies.

Avec la donnée initiale à l'instant  $t_0$  égale à  $x_0$ , l'équation (2.1) définit, par la formule

$$U(t, t_0)(x_0) = x(t),$$

une famille d'applications bijectives continues dans  $\mathbf{R}^n$ .

D'autre part on introduit l'équation aux dérivées partielles du premier ordre, dite équation de Liouville, associée à ce champ de vecteurs :

$$\partial_t f(t, x) + X(t, x) \cdot \nabla_x f(t, x) = 0 \quad (2.2)$$

$$(\nabla_x f := (\partial_{x_1} f, \partial_{x_2} f, \dots, \partial_{x_n} f))$$

et on observe que pour toute solution  $x(t)$  de l'équation différentielle on a  $\frac{d}{dt} f(t, x(t)) = 0$ .

On en déduit que la solution de (2.2) est uniquement déterminée en fonction de sa donnée initiale

$$f(0, x) = \phi(x) \quad (2.3)$$

par la formule suivante :

$$f(t, x) = \phi(x(0)), \quad \text{avec } \dot{x}(s) = X(s, x(s)) \text{ et } x(t) = x. \quad (2.4)$$

Cela vaut la peine d'exhiber en les détaillant les propriétés du problème (2.2) : la solution est une fonction de  $(t, x)$  définie pour  $t \in \mathbf{R}$ , déterminée de manière unique en fonction des données initiales,

et l'application  $\phi \mapsto f(t, \cdot)$  est continue dans les espaces fonctionnels "naturels". Le support de  $f(t, \cdot)$  coïncide avec l'image du support de  $\phi$  par l'application  $x \mapsto U(t, 0)x$ . Si la donnée initiale est positive, il en est de même de la solution à tout instant. En supposant  $\phi(x) \geq 0$  et en intégrant l'équation (??) on obtient (par intégration par partie) :

$$\frac{d}{dt} \int f(t, x) dx = - \int X(t, x) \cdot \nabla_x f(t, x) dx = \int \nabla \cdot X(x, t) f(t, x) dx.$$

De plus on a :

$$\frac{d}{dt} \int f(t, x) dx = \int \phi(x(0)) \frac{d}{dt} \left( \left| \frac{dx(t)}{dx(0)} \right| \right) d(x(0)) = \int \nabla \cdot X(x, t) \phi(x(0)) \left| \frac{dx}{dx(0)} \right| d(x(0)).$$

On en déduit, pour le Jacobien de la transformation  $x(0) \mapsto U(t, 0)x(0)$  noté  $J(t, x) = \left( \left| \frac{dx(t)}{dx(0)} \right| \right)$ , la relation :

$$\frac{1}{J(x(t), t)} \frac{dJ(x(t), t)}{dt} = \nabla \cdot X(t, x(t))$$

et donc,

$$J(x(t), t) = e^{\int_0^t \nabla \cdot X(s, x(s)) \cdot ds}$$

Bien entendu , si le champ de vecteur est constant  $X = v$ , la solution de

$$\partial_t f(t, x) + v \cdot \nabla_x f(t, x) = 0$$

s'écrit

$$f(t, x) = \phi(x - vt)$$

et il s'agit d'une "onde" qui se propage à la vitesse  $v$ .

Ce qui précède s'applique à des champs de vecteurs définis non plus sur  $\mathbf{R}^n$  mais sur  $\mathbf{R}^{2n}$  que l'on peut identifier à  $\mathbf{R}^n \times \mathbf{R}^n$ . Le second espace s'identifiant alors soit à l'espace des vecteurs tangents, soit à l'espace des vecteurs cotangents à  $\mathbf{R}^n$ . Dans ce cadre il convient de considérer le système Hamiltonien :

$$\dot{x} = \nabla_\xi H(t, x, \xi), \quad \dot{\xi} = -\nabla_x H(t, x, \xi)$$

et l'équation de Liouville correspondante

$$\partial_t f + \nabla_\xi H \cdot \nabla_x f - \nabla_x H \cdot \nabla_\xi f = 0. \quad (2.5)$$

Une propriété essentielle et simple de la dynamique hamiltonienne est la conservation de la mesure dans l'espace des phases. Cela se déduit immédiatement de (2.5) en observant que l'on a :

$$\nabla_{(x, \xi)} \cdot (\nabla_\xi H, -\nabla_x H) = 0.$$

L'équation (??) s'écrit de manière intrinsèque (indépendante de changement de coordonnées conve-nables) en faisant apparaître le crochet de Poisson :

$$\begin{aligned} \{H, f\} &= -(\nabla_\xi H \cdot \nabla_x f - \nabla_x H \cdot \nabla_\xi f) \\ \nabla_t f + \{H, f\} &= 0. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Si  $H = \frac{1}{2}|\xi|^2 + V(x)$  est l'hamiltonien de la mécanique classique, on a le système différentiel

$$\dot{x} = \xi, \quad \dot{\xi} = -\nabla_x V(t, x, \xi)$$

et l'équation de Liouville :

$$\nabla_t f + \xi \cdot \nabla_x f - \nabla_x V \cdot \nabla_\xi f = 0.$$

Elle apparaît comme membre de gauche de toute équation cinétique, c'est à dire destinée à décrire l'évolution d'une densité  $f(t, x, \xi)$  de particules qui au point  $x$  et au temps  $t$  ont la vitesse  $\xi$ . Cette équation est alors modifiée par l'adjonction de termes qui représentent les chocs entre particules (équation de Boltzmann), la réaction avec le milieu ambiant équation de Lorentz (également utilisée pour le transport de neutrons) etc...voir les Sections 9 et 10.

## 2.2 Intégration des équations de Hamilton-Jacobi

Les équations de Hamilton/Liouville apparaissent naturellement dans l'intégration de l'équation de Hamilton-Jacobi :

$$\begin{cases} \partial_t S(t, x) + H(t, x, \nabla_x S(t, x)) & = 0 \\ S(0, x) & = S_0(x). \end{cases} \quad (2.7)$$

Remarquons que  $S(t, x)$  est une fonction scalaire des variables  $(t, x)$  alors que le Hamiltonien  $H(t, x, \xi)$  est défini sur  $\mathbf{R}_t \times \mathbf{R}_x^n \times \mathbf{R}_\xi^n$ . Pour analyser les solutions de l'équation (2.7) il convient d'en prendre le gradient et l'on obtient, pour  $\Xi(x, t) := \nabla S(t, x)$ , l'équation suivante :

$$\partial_t \Xi(t, x) + \nabla_\xi H(t, x, \Xi) \cdot \nabla_x \Xi(t, x) + \nabla_x H(t, x, \Xi) = 0, \quad \Xi(0, x) = \nabla S(0, x) = \nabla S_0(x).$$

On introduit ensuite le champ de vecteurs (sur le fibré cotangent) défini par les équations :

$$\dot{x} = \nabla_\xi H(t, x, \xi), \quad \dot{\xi}(t, x) = -\nabla_x H(t, x, \xi) \quad x(0) = x_0, \quad \xi(0) = \nabla_x S_0(x_0).$$

On observe directement (appliquer la formule de Leibniz pour la dérivée de la composition de deux fonctions) que toute solution de (2.7) fournit, par la formule :

$$\begin{aligned} \dot{x}(t) &= \nabla_\xi H(t, x(t), \nabla_x S(t, x(t))), \quad x(0) = x_0. \\ \dot{\xi}(t) &= \nabla_x S(t, x(t)), \end{aligned} \quad (2.8)$$

une solution de (2.8). Inversement, pour  $|t|$  assez petit, l'application :

$$x_0 \mapsto U_{\nabla_x S_0}^t(x_0) := x(t)$$

où  $x(t)$  est défini par

$$\begin{cases} \dot{x}(t) = \nabla_\xi H(t, x(t), \xi(t)) \\ \dot{\xi}(t) = -\nabla_x H(t, x(t), \xi(t)) \end{cases} \quad (2.9)$$

avec les données initiales

$$x(0) = x_0, \quad \xi(0) = \nabla_x S_0(x_0),$$



est une bijection de  $\mathbf{R}^n$  sur  $\mathbf{R}^n$ . Ceci définit un champ de vecteurs  $\theta(t, x)$  par la formule :

$$\theta(t, x) = \xi(t)$$

où  $\xi(t)$  est solution du système (2.9) avec des données initiales données par

$$\begin{cases} x(0) &= (U_{\nabla_x S_0}^t)^{-1}(x), \\ \xi(0) &= \nabla_x S_0((U_{\nabla_x S_0}^t)^{-1}(x)). \end{cases}$$

La fonction  $\theta(t, x)$  étant ainsi construite, on termine la construction de  $S(t, x)$  en prouvant que la relation :

$$\forall i, j, \partial_{x_i} \theta_j(t, x) - \partial_{x_j} \theta_i(t, x) = 0,$$

vraie pour  $t = 0$ , est vraie pour tout temps. Ainsi on peut écrire  $\theta(x, t) = \nabla_x S(t, x)$  et la constante (en  $x$ ) qui apparaîtrait dans la détermination de  $S(x, t)$  s'obtient en utilisant une dernière fois l'équation :

$$\partial_t S = -H(t, x, \theta(x, t)).$$

La résolution du système

$$\dot{x}(t) = \nabla_x H(t, x(t), \xi(t)), \quad \dot{\xi}(t) = -\nabla_x H(t, x(t), \xi(t)) \quad (2.10)$$

avec les données initiales

$$x(0) = X, \quad \xi(0) = \nabla_x S_0(X) \quad (2.11)$$

définit pour tout  $t \in \mathbf{R}$  fixé et  $X \in \mathbf{R}^n$  une sous variété

$$\Gamma = (x(t, X), \xi(t, X))$$

de dimension  $n$  de  $T^*(\mathbf{R}^n)$ . Pour  $t$  petit la projection  $(x(t, X), \xi(t, X)) \mapsto x = \pi(X(t, X))$  est une bijection mais les difficultés dans la résolution de l'équation d'Hamilton-Jacobi et dans son utilisation ultérieure proviennent du fait que la bijectivité peut cesser d'être vraie pour  $t$  au delà d'une valeur critique. C'est ce qui conduira à l'apparition de singularités dans l'équation de Hamilton-Jacobi. En revanche la variété  $\Gamma$  se propage sans singularité pour tout temps ce qui suggère que le bon point de vue est celui du fibré cotangent muni de sa structure symplectique. Nous retrouverons cette discussion dans la Section (3.2.2). L'apparition des singularités dans l'équation de Hamilton-Jacobi provient donc du premier temps  $t$  pour lequel la projection sur l'espace des  $X$  devient singulière (phénomène d'apparition de caustiques).

L'exemple le plus simple révélant cette pathologie est, en dimension 1, l'équation :

$$\partial_t S + \frac{1}{2}(\nabla_x S)^2 = 0, \quad S(0, x) = S_0(x). \quad (2.12)$$

Avec  $u(t, x) = \nabla_x S(t, x)$  on obtient, en dérivant, l'équation dite "de Burger" :

$$\partial_t u + u \nabla_x u = 0, \quad u(0, x) = u_0(x).$$

Dans ce cadre le hamiltonien n'est autre que  $H(t, x, \xi) = \frac{1}{2}\xi^2$ . Il est donc indépendant de  $x$  et le système hamiltonien s'écrit

$$\dot{x}(t) = \xi(t), \dot{\xi}(t) = 0, x(0) = X, \xi(0) = u_0(X).$$

Il s'intègre à vue pour donner :

$$\xi(t) = u_0(X), x(t) = X + tu_0(X).$$

On observe que la projection

$$(x(X, t), \xi(X, t)) \mapsto x(t) = X + tu_0(X)$$

est une bijection tant que l'application  $X \mapsto X + tu_0(X)$  reste strictement croissante c'est à dire tant que

$$t < \frac{1}{\text{Max}(-\nabla_x u_0(x))}.$$

En fait l'équation de Burger est un modèle super-simplifié et idéalisé des équations de la mécanique des fluides. Il correspond à une distribution unidimensionnelle de particules qui se propagent sans force extérieure et sans interaction entre elles. Si on désigne par  $u(x, t)$  la vitesse de la particule qui, à l'instant  $t$ , est au point  $x$ , la relation fondamentale de la mécanique s'écrit bien :

$$0 = \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = \frac{d}{dt}u(t, x(t)) = \partial_t u(t, x(t)) + \nabla_x u(t, x(t))\dot{x}(t) = \partial_t u + u\nabla_x u. \quad (2.13)$$

Cela traduit le fait que, en l'absence de force extérieure ou d'interaction, la vitesse des particules demeure constante. S'il y a des points  $x_- < x_+$  tels que  $u_0(x_-) > u_0(x_+)$ , alors, au temps  $t$  donné par,

$$t = \frac{x_+ - x_-}{u_0(x_-) - u_0(x_+)},$$

les deux particules, issues des points  $x_-$  et  $x_+$  avec les vitesses  $u_0(x_-)$  et  $u_0(x_+)$ , se rencontrent et la vitesse n'est plus déterminée. On a un choc. Il y a plusieurs manières très différentes de prolonger la solution de l'équation de Burger après le choc.

Cela est fait dans la Section suivante en s'inspirant de la problématique du contrôle optimal ; le prolongement proposé dans la Section 8.2 conduit à l'introduction de solutions entropiques et cette démarche sert de modèle à l'analyse de problèmes plus compliqués posés par l'équation d'Euler compressible.

### 2.3 Equation de Hamilton-Jacobi et contrôle optimal

Comme on vient de le voir sur l'équation de Burger le gradient  $\nabla_x S(x, t)$  d'une solution de l'équation de Hamilton Jacobi ne peut, en général, rester continu pour tout temps. Cependant, comme cette équation apparaît dans des problèmes de contrôle optimal pour des temps arbitrairement grands, on est amené à définir des solutions faibles.

Le principe sous-jacent à la définition de solution faible d'une équation du type :

$$\partial_t u + \nabla_x \cdot F(u) = 0, \quad (2.14)$$

et systématiquement généralisable à d'autres situations, est le suivant :

*u est suffisamment régulière pour que le terme non-linéaire  $F(u)$  ait un sens et l'équation est satisfaite au sens des distributions, c'est-à-dire que :*

$$\int \int (u \partial_t \varphi + F(u) \cdot \nabla_x \varphi) dx dt = 0,$$

pour toute fonction  $\varphi$  indéfiniment différentiable et à support compact.

Par analogie avec une démarche de mécanique des fluides (non utilisée dans cette section mais exposée dans la Section 8.2) on parle de *solution de viscosité*. Pour simplifier (en fait, par des estimations a priori, non pas sur la régularité, mais seulement sur la taille de  $S_0$  et  $\nabla_x S_0$ , on peut souvent se ramener à ce cas) on suppose que le Hamiltonien  $H$  satisfait aux conditions de Lipschitz continuité suivantes : pour tous  $(x, t), (y, s) \in \mathbf{R}^{n+1}$  et  $p, q \in \mathbf{R}^n$  on a, avec  $C$  constante absolue, :

$$|H(x, t, p) - H(x, t, q)| \leq C|p - q|; \quad |H(x, t, p) - H(y, s, p)| \leq C(|x - y| + |t - s|)(1 + |p|).$$

**Definition 2.1** *On dit qu'une fonction  $S$  uniformément continue sur  $\mathbf{R}_x^n \times \mathbf{R}_{t+}$  est une solution de viscosité de l'équation de Hamilton-Jacobi*

$$\partial_t S + H(x, t, \nabla S) = 0$$

*si, en tout point  $(x_0, t_0)$  et pour toute fonction  $\mathcal{S}(x, t) \in C^\infty(\mathbf{R}_x^n \times \mathbf{R}_{t+})$  indéfiniment dérivable, les propriétés suivantes sont satisfaites.*

$$S - \mathcal{S} \text{ a un maximum local en } (x_0, t_0) \Rightarrow (\partial_t \mathcal{S} + H(x, t, \nabla_x \mathcal{S}))(x_0, t_0) \leq 0, \quad (2.15)$$

$$S - \mathcal{S} \text{ a un minimum local en } (x_0, t_0) \Rightarrow (\partial_t \mathcal{S} + H(x, t, \nabla_x \mathcal{S}))(x_0, t_0) \geq 0. \quad (2.16)$$

La définition ci-dessus est une extension cohérente de la définition classique de solution de l'équation de Hamilton-Jacobi. C'est bien une extension car les formules (2.15) et (2.16) ont un sens dès que la fonction  $S$  est continue (pour avoir une définition d'extrema) et sans hypothèse sur les dérivées. Elle est cohérente car, si  $S$  est continûment dérivable en  $(x_0, t_0)$ , dès que ce point est un extrema local, pour  $S - \mathcal{S}$  on a :

$$\partial_t S(x_0, t_0) = \partial_t \mathcal{S}(x_0, t_0) \text{ et } \nabla_x S(x_0, t_0) = \nabla_x \mathcal{S}(x_0, t_0).$$

(2.15) et (2.16) suffisent pour déduire que  $S$  est, au voisinage de  $(x_0, t_0)$ , solution classique de l'équation de Hamilton-Jacobi. On a la proposition suivante :

**Proposition 2.1** *Soient  $S_{1,2}(x, t)$  deux fonctions uniformément continues et bornées sur  $\mathbf{R}_x^n \times \mathbf{R}_{t+}$  solutions de viscosité de l'équation d'Hamilton-Jacobi (selon la définition (2.1)) alors, si elles coïncident à  $t = 0$ , elles coïncident partout.*

L'intérêt essentiel de la notion est d'avoir une solution globale (pour tout  $t > 0$ ). Lorsque l'hamiltonien  $H(t, x, \xi)$  est convexe par rapport à  $\xi$  on peut interpréter la solution de viscosité comme la solution d'un problème de contrôle optimal. Ce point de vue fournit d'ailleurs une démonstration directe d'existence de cette solution. En effet, en se limitant pour simplifier au cas où  $H$  est convexe et ne dépend pas de  $t$ , on introduit dans  $\mathbf{R}^n$  la solution du système dynamique

$$\dot{x}(s) = f(x(s), \alpha(s)), \quad (t < s < T); \quad x(t) = x,$$

où la fonction  $f$  (supposée régulière) est définie sur  $\mathbf{R}^n \times A$  à valeur dans  $\mathbf{R}^n$  avec  $A$  désignant un sous ensemble compact de  $\mathbf{R}^m$ . L'ensemble  $\mathcal{A}$  des applications mesurables  $\alpha$  de  $[0, T]$  dans  $A$  représente l'ensemble des *contrôles admissibles*. Le vecteur  $x(s)$  représente l'état du système à l'instant  $s \in [t, T]$  et l'objectif est d'amener ce système à réaliser à l'instant  $T$  une propriété représentée par une fonction  $g(x(T))$  avec un coût minimal représenté par une fonction  $h(x, t)$  sous les contraintes que  $x$  et  $\alpha$  satisfassent l'équation précédente. On minimise donc, par rapport à  $\alpha(\cdot) \in \mathcal{A}$  la fonction :

$$C_{x,t}[\alpha(\cdot)] = \int_t^T h(x(s), \alpha(s)) ds + g(x(T))$$

avec  $x(s)$  solution de (2.17) en se concentrant sur la fonction de moindre coût

$$u(x, t) = \inf_{\alpha(\cdot) \in \mathcal{A}} \{C_{x,t}[\alpha(\cdot)], x \in \mathbf{R}^n, 0 \leq t \leq T\}.$$

Cette fonction (objet de la programmation dynamique) est donc toujours définie; on prouve qu'elle est uniformément lipschitzienne et bornée et de l'unicité de la solution du système dynamique, on déduit le théorème d'optimalité :

**Théorème 2.1** *La fonction de moindre coût satisfait l'équation fonctionnelle suivante :*

$$\forall 0 < t < s < T, u(x, t) = \inf_{\alpha(\cdot) \in \mathcal{A}} \left\{ \int_t^s h(x(s), \alpha(s)) ds + g(u(x(s), s)) \right\}$$

.

Enfin on déduit de ce théorème l'énoncé suivant :

**Théorème 2.2** *La fonction de moindre coût est solution de viscosité de l'équation de Hamilton Jacobi-Bellman :*

$$u_t + \min_{a \in A} \{f(x, a) \cdot \nabla u + h(x, a)\} = 0, \quad \text{dans } \mathbf{R}^n \times ]0, T[; \quad u = g \text{ sur } \mathbf{R}^n \times \{t = T\}.$$

Le théorème (2.2) conduit à un algorithme de calcul de la fonction de moindre coût.

Ensuite, pour en déduire la solution de l'équation d'Hamilton-Jacobi-Bellman, on procède comme suit :

On choisit pour  $h$  la transformée de Legendre de  $H$  :

$$h(x, a) = \min_{p \in \mathbf{R}^n} \{a \cdot p + H(x, p)\},$$

et on utilise la propriété involutive de cette transformation : sous l'hypothèse  $H$  convexe on a également :

$$H(x, a) = \min_{p \in \mathbf{R}^n} \{a \cdot p + h(x, p)\},$$

On choisit ensuite pour  $\mathcal{A}$  un hypercube assez grand de  $\mathbf{R}^n$ , pour  $f(x, a)$  la fonction constante  $f(x, a) = a$  et enfin on change  $t$  en  $T - t$  pour se ramener à une donnée  $g$  à l'instant  $t = 0$ .

### 3 La dynamique quantique

#### 3.1 L'équation de Schrödinger linéaire

La mécanique quantique a considérablement dépassé, depuis 25 ans, son cadre initial. Les expériences du début des années 80, montrant que les inégalités de Bell étaient violées, et donc que la mécanique quantique telle qu'elle avait été énoncée dès ses débuts était correcte, ont permis de déverrouiller certains blocages, et ont ouvert la porte à nombre de réalisations expérimentales de plus en plus appliquées. Nous allons donc y consacrer une section substantielle. Notons que le défi que représente la construction d'ordinateurs quantiques pourrait bien être relevé dans le futur par des progrès et idées technologiques.

Signalons enfin que dans les 25 dernières années une physique expérimentale des systèmes quantiques simples est née, et que bien des modèles mathématiques autrefois considérés comme académiques sont maintenant en prise directe avec la physique expérimentale d'aujourd'hui.

##### 3.1.1 L'équation fondamentale

L'équation de Schrödinger possède un statut particulier parmi les équations de la physique mathématique. Alors que bien des équations concernent des quantités *macroscopiques* et sont dérivées à partir de considérations *microscopiques*, l'équation de Schrödinger traite de l'objet le plus microscopique qui soit, la fonction d'onde de l'électron, et, si elle n'est dérivée de (presque) rien, elle s'inspire de considérations macroscopiques telles qu'énergie, moment angulaire etc. Dans le cas d'une particule dont l'énergie est la somme d'une partie cinétique et d'une partie potentielle, l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + V \right) \psi.$$

Ici  $\hbar > 0$  est la constante de Planck,  $\Delta$  est le laplacien sur  $\mathbf{R}^n$ ,  $V$  un opérateur de multiplication par la fonction  $V(x)$  et  $\psi$  est une fonction (dépendante du temps  $t$ ) dans  $L^2(\mathbf{R}^n, dx)$ .

Dans bien des situations *l'opérateur*  $-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + V$  est remplacé par une *fonction* quelconque  $H(-i\hbar \nabla, x)$  dans laquelle, puisque les opérateurs  $\nabla$  et "multiplication par  $x$ " ne commutent pas, l'ordre doit être

spécifié. Citons par exemple la présence d'un champ magnétique (constant) qui donne lieu à l'opérateur

$$-\frac{1}{2}(-i\hbar\nabla_x - A)^2 + V(x)$$

et les cas de réduction par un groupe de symétries. La condition fondamentale est que  $H := H(-i\hbar\nabla, x)$  soit un opérateur auto-adjoint, d'où la section suivante.

### 3.1.2 Existence de la dynamique et analyse fonctionnelle

Nous allons énoncer dans cette section un certain nombre de résultats d'analyse fonctionnelle utilisés dans beaucoup d'autres domaines des équations aux dérivées partielles, mais que nous plaçons ici en raison du fait qu'ils sont pertinents pour la mécanique quantique et aussi parce que l'équation de Schrödinger a été historiquement une des motivations de leur élaboration.

Soit  $A$  une matrice  $n \times n$ . Alors la série

$$\sum_0^{\infty} \frac{(tA)^n}{n!}$$

converge pour tout  $t$  et définit un groupe de matrices  $n \times n$  que l'on note  $e^{tA}$ . La généralisation de cette formule au cas où  $A$  est un opérateur *borné* (voir plus bas pour la définition) sur un espace (de Banach ou Hilbert) de dimension infinie est élémentaire. De plus la solution du problème

$$\frac{du}{dt} + Au = f, u(0) = u_0$$

est donnée par la formule de Duhamel

$$u(t) = e^{-tA}u_0 + \int_0^t e^{-(t-s)A}f(s)ds.$$

Si au lieu d'un Banach on a un Hilbert, alors, en prenant le produit scalaire de

$$\frac{du}{dt} + Au = 0 \tag{3.17}$$

avec  $u(t)$  et en prenant la partie réelle, on observe que

- i)  $A$  antihermitien  $\Leftrightarrow e^{-tA}$  unitaire.
- ii)  $A$  accretif (ie  $Re(Au, u) \geq 0$ )  $\Leftrightarrow \{t \geq 0 \Rightarrow \|e^{-tA}\| \leq 1\}$

Anticipant sur la suite on dit que, dans ce dernier cas,  $e^{-tA}$  est un semi groupe à contraction.

Les théorèmes de Stone et Hille-Yosida-Phillips sont la généralisation de cette remarque aux opérateurs non bornés. Celle-ci est hautement non-élémentaire, et le point crucial est le fait que pour certains  $A$  non-bornés, donc pas vraiment défini sur tout l'espace de Hilbert, on peut définir  $e^{-tA}$  comme un opérateur défini *sur tout l'espace de Hilbert*. On a donc la situation suivante : il se peut que la solution d'une équation du type (3.17) soit définie pour *toute* condition initiale, alors que l'équation elle-même n'est bien définie *que sur un sous-ensemble dense*. C'est là une particularité des EDP linéaires.

Pour cela et bien que ce ne soit pas l'objet principal de notre propos rappelons brièvement un peu d'analyse fonctionnelle.

Un espace de Hilbert est un espace de Banach, espace vectoriel normé complet, muni d'un produit scalaire  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ , c'est à dire que la norme d'un vecteur  $x$  est donnée par le produit scalaire :  $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$ . Un opérateur  $H$  sur un espace de Hilbert  $\mathcal{H}$  est borné s'il est continu, ce qui revient à dire qu'il existe une constante  $C$  telle que  $\forall \psi \in \mathcal{H}, \|H\psi\| \leq C\|\psi\|$ . Un opérateur non borné est défini, en général, sur un sous-espace dense  $D(H)$  de  $\mathcal{H}$  (on dit alors qu'il est densément défini). Un opérateur non borné est donc une application linéaire de  $D(H)$  dans  $\mathcal{H}$ .

Pour un opérateur  $H$  à domaine dense, on définit  $D(H^*)$  comme l'ensemble des vecteurs  $\varphi \in \mathcal{H}$  pour lesquels il existe un vecteur  $\varphi' \in \mathcal{H}$  vérifiant :

$$\forall \psi \in D(H), \langle H\psi, \varphi \rangle = \langle \psi, \varphi' \rangle$$

Pour  $\varphi \in D(H^*)$ , domaine de l'adjoint on pose  $H^*\varphi = \varphi'$ . Grâce à la densité du domaine de  $H$ ,  $\varphi'$  est déterminé de façon unique.

Un opérateur  $H$  sur  $\mathcal{H}$  est dit auto-adjoint lorsque  $D(H) = D(H^*)$  et  $T = T^*$  sur  $D(H)$ . Malheureusement dans beaucoup de cas intéressants  $D(H^*)$  est beaucoup plus petit que  $D(H)$ , parfois même

$$D(H^*) = \{0\}.$$

Le graphe d'un opérateur linéaire est l'ensemble des couples de vecteurs de la forme  $(\phi, H\phi)$ . Le graphe de  $H$  est un sous-espace de  $\mathcal{H} \times \mathcal{H}$  qui est muni de produit scalaire

$$\langle (\phi_1, \psi_1), (\phi_2, \psi_2) \rangle := \langle \phi_1, \phi_2 \rangle + \langle \psi_1, \psi_2 \rangle.$$

$H$  est dit fermé si son graphe l'est.  $H$  est dit fermable si il existe un opérateur fermé  $H'$  dont le graphe contient celui de  $H$ . La fermeture de  $H$  est défini par le plus petit tel  $H'$ , c'est à dire celui défini sur le plus petit domaine contenant  $D(H)$  et tel que  $H = H'$  sur  $D(H)$ . Finalement  $H$  est essentiellement auto-adjoint si sa fermeture est auto-adjointe.

**Théorème 3.1** (Stone) *si  $H$  est un opérateur essentiellement auto-adjoint sur  $\mathcal{H}$  (remarquons qu'alors  $i\frac{H}{\hbar}$  est antihermitien), alors la solution de l'équation*

$$\begin{cases} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^t &= H\psi^t. \\ \psi^{t=0} &= \varphi \in \mathcal{H} \end{cases}$$

est donnée par un opérateur unitaire  $U(t)$  que l'on note  $e^{itH/\hbar}$  par analogie avec le cas matriciel, c'est à dire que :

$$\psi^t = e^{itH/\hbar} \varphi.$$

Ce théorème assure donc l'existence de la dynamique quantique dans la classe unitaire dès que l'opérateur  $H$  est essentiellement autoadjoint ce qui est en particulier réalisé dans le cas :

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + V(x)$$

lorsque  $V$  est, par exemple, le potentiel coulombien ( $V(x) = -|x|^{-1}$ ) (ce qui résulte du théorème 3.4 et de l'inégalité (3.27) vérifiée par le potentiel coulombien (voir plus bas)).

L'énoncé et la démonstration du théorème de Stone peuvent s'adapter à des équations d'évolution de la forme :

$$i\partial_t\Psi = L(t)\Psi, \quad \Psi(t_0) = \Psi_{t_0}, \quad (3.18)$$

lorsque  $L(t)$  représente une famille d'opérateurs autoadjoints mais non bornés. Il convient seulement de supposer que  $D(L(t))$  domaine de  $L(t)$  est indépendant de  $t$  (ou éventuellement varie très régulièrement avec  $t$ ).

La dynamique définie par (3.18) est donnée par une famille d'opérateurs unitaires  $U(t, s)$  solutions de l'équation :

$$i\frac{dU(t, s)}{dt} = L(t)U(t, s), \quad U(s, s) = Id, \quad \Psi(t) = U(t, t_0)\Psi_{t_0}$$

la propriété de groupe étant remplacée par la relation :

$$\forall t, s, t_0 \quad U(t, s)U(s, t_0) = U(t, t_0)$$

Dans le cas où l'opérateur n'est plus auto-adjoint, et dans le cas d'une équation posée uniquement pour des temps positifs (l'exemple le plus fondamental étant l'équation de la chaleur, voir la section (6) ci-dessous), le théorème de Yosida entre en jeu.

**Théorème 3.2** (Yosida) *soit un opérateur  $A$  densément défini tel que  $\forall\psi \in D(A) \operatorname{Re}\langle \psi, A\psi \rangle \geq 0$  (accrétivité) et  $\forall\psi \in D(A^*) \operatorname{Re}\langle \psi, A^*\psi \rangle \geq 0$ , alors la solution de*

$$\partial_t\psi = -A\psi$$

*est définie, pour  $t \geq 0$ , par un semi-groupe à contraction  $e^{-tA}$  avec  $\|e^{-tA}\| \leq 1$ .*

### 3.1.3 Aspects spectraux et théorie de la diffusion

Il est bien connu qu'une matrice  $n \times n$  hermitienne (auto-adjointe) est *diagonalisable*, et que ses vecteurs propres  $e_i$  forment une base orthonormée. Tout élément de l'espace se décompose donc sous la forme :

$$\varphi = \sum_i \langle \varphi, e_i \rangle e_i. \quad (3.19)$$

Cela s'adapte aux espaces de dimension infinie, mais avec un surcroît de complexité. On définit le spectre d'un opérateur (possiblement non borné)  $A$  dans un espace de Banach ou de Hilbert dans le cadre de l'équation de Schrödinger comme l'ensemble des nombres complexes  $\lambda$  tels que l'opérateur  $\lambda I - A$ , où  $I$  est l'identité, ne soit pas bijectif. Le théorème de Banach-Steinhaus permet d'affirmer que si l'opérateur est fermé, et en particulier s'il est autoadjoint, son spectre est un sous ensemble fermé de  $\mathbf{C}$ . Sur son complémentaire l'application  $\lambda \mapsto (\lambda I - A)^{-1}$  est analytique. Des exemples simples, mais pathologiques, montrent qu'ainsi défini ce spectre peut être vide ou égal à tout le plan complexe. Par contre le spectre d'un opérateur  $A$  autoadjoint est toujours non vide et contenu dans l'axe réel. De plus il est borné si et seulement  $A$  est un opérateur borné.



On caractérise le spectre ponctuel ou discret comme l'ensemble des points  $\lambda \in \mathbf{R}$  du spectre qui sont pôles de multiplicité finie de la fonction

$$\lambda \mapsto (\lambda I - A)^{-1}$$

Le reste du spectre est dit spectre continu.

Dans le cas autoadjoint la formule (3.19) se généralise grâce à l'introduction d'une mesure spectrale  $d\mu(\lambda)$  et d'une famille de projecteurs spectraux  $E(\lambda)$ . On a ainsi, pour tout  $\varphi$  dans l'espace de Hilbert,

$$\varphi = \int_{\mathbf{R}} E(\lambda)\varphi d\mu(\lambda).$$

Sous des hypothèses convenables sur la fonction  $f$  (en particulier avec  $f(\lambda) = e^{it\lambda}$  dans le cadre du théorème de Stone évoqué ci-dessus) on a

$$f(A)\varphi = \int_{\mathbf{R}} f(\lambda)E(\lambda)\varphi d\mu(\lambda).$$

La trace d'une matrice  $n \times n$  est la somme de ses valeurs propres (comptées avec leur multiplicité) et coïncide avec la somme des termes diagonaux. Cette notion s'adapte au cas d'un opérateur borné  $B$  dont le spectre est formé de valeurs propres  $\lambda_i$  de multiplicité finie. En particulier si  $B$  est un opérateur borné représenté par un noyau  $K(x, y)$  on a (sous des hypothèses convenables)

$$\text{Trace}(B) = \sum \lambda_i = \int K(x, x)dx.$$

Le cas spectral le plus simple est celui où le spectre se divise en deux parties : spectre discret (valeurs propres et vecteurs propres correspondants appartenant à l'espace de Hilbert) et spectre continu. Ces deux parties correspondent à des dynamiques classiques sous-jacentes très différentes : le spectre discret aux trajectoires qui restent confinées et le spectre continu aux trajectoires échappant à l'infini. Donnons 3 exemples :

1.  $H = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta$  sur  $\mathbf{R}^n$  : alors les trajectoires classiques sont libres et peuvent, à toute énergie, aller à l'infini ; le spectre est purement continu.
2.  $H = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V(x)$  avec  $V(x) \rightarrow +\infty$  quand  $|x| \rightarrow \infty$  (potentiel confinant) : alors la conservation de l'énergie impose aux trajectoires de rester dans la variété compacte  $\{(p, q)/p^2 + V(q) = E\}$  : le spectre est purement discret. La situation est analogue (cf. Section 4.2) lorsqu'on considère un laplacien dans un domaine borné avec des conditions aux limites convenables. C'est dans ce cadre que la formule (3.19) se généralise le plus explicitement. Le spectre est formé d'une suite de valeurs propres réelles  $\lambda_i$  de multiplicité finie tendant vers l'infini et les vecteurs propres correspondant  $e_i$  deux à deux orthogonaux forment une base hilbertienne (au sens de la convergence  $L^2$ ) :

$$\varphi = \sum_{1 \leq i \leq \infty} (\varphi, e_i)e_i$$

3.  $H = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V(x)$  avec  $V(x) \rightarrow 0$  quand  $|x| \rightarrow \infty$  (par exemple le potentiel coulombien) : alors pour des énergies négatives (qui n'existent que s'il y a des régions de l'espace où le potentiel  $V(x)$  est négatif) les trajectoires restent confinées et pour une énergie positive elles partent à l'infini ; le spectre négatif est discret et le spectre positif continu.

Le premier exemple se résout explicitement à l'aide de la transformation de Fourier

$$\hat{\varphi}(\xi, t) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int e^{-i\langle x, \xi \rangle} \varphi(x, t) dx.$$

L'équation de Schrödinger devient

$$i\partial_t \hat{\varphi} - \frac{\hbar}{2} |\xi|^2 \hat{\varphi} = 0$$

dont la solution en fonction de la donnée initiale est

$$\varphi(\xi, t) = e^{-ith|\xi|^2/2} \hat{\phi}(\xi).$$

Cette formule illustre bien les propriétés de groupe unitaire et le théorème de Stone. En revenant de l'espace Fourier à l'espace physique la multiplication par  $e^{-ith|\xi|^2/2}$  se transforme en la convolution par la fonction

$$\frac{e^{i(\text{sign } t)id\frac{\pi}{4}}}{|2\pi\hbar t|^{d/2}} e^{i\frac{|x|^2}{2\hbar|t|}}.$$

Ainsi la solution de l'équation :

$$i\hbar\partial_t\varphi = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta\varphi, \quad \varphi(x, 0) = \phi(x)$$

est donnée pour  $t > 0$  par la formule :

$$\varphi(x, t) = \frac{e^{id\frac{\pi}{4}}}{|2\pi\hbar t|^{d/2}} \int_{\mathbf{R}^d} e^{i\frac{|x-y|^2}{2\hbar t}} \phi(y) dy,$$

dont le premier intérêt de (3.20) est de mettre en évidence l'effet de dispersion qui correspond au fait que toutes les trajectoires classiques sont des "droites" qui s'en vont à l'infini. Pour des données initiales dans  $L^1(\mathbf{R}^d)$  la solution (bien que de norme  $L^2(\mathbf{R}^d)$  constante (théorème de Stone cité ci-dessus)) tend ponctuellement vers zéro lorsque  $t \rightarrow +\infty$ , étant majorée par :

$$\frac{1}{(2\pi\hbar t)^{d/2}} \int_{\mathbf{R}^d} |\phi(y)| dy.$$

Une telle majoration conduit aux inégalités dites de Strichartz qui jouent un rôle essentiel dans les perturbations non linéaires d'équations de type Schrödinger.

Le deuxième exemple conduit à une représentation de la solution de

$$i\hbar\partial_t\varphi = -\frac{\hbar^2}{2}\Delta\varphi + V(x)\varphi, \quad \varphi(x, 0) = \phi(x)$$

sous la forme d'une série de termes oscillants :

$$\varphi(x, t) = \sum_j e^{\frac{iE_j t}{\hbar}} \langle \phi, e_j \rangle e_j(x)$$

ce qui met en évidence le caractère quasi-périodique de l'évolution.

Cependant cette formule ne peut être souvent utilisée. En effet, d'une part en dehors de quelques cas modèles (oscillateur harmonique ou problèmes posés avec  $V = 0$  sur la sphère, dans un disque ou dans un cube) les valeurs propres  $E_j$  et a fortiori les fonctions propres  $e_j(x)$  ne sont pas connues. De plus comme nous le verrons plus bas, des estimations de type "Weyl" montrent que

$$\#\{E_j \in [E - c\hbar, E + c\hbar]\} \sim h^{-(d-1)}$$

donc, la constante de Planck étant très petite, le nombre de quasi-périodes est très grand, rendant la formule (3.20) en général inutilisable.

Le troisième exemple combine les observations faites dans les deux premiers cas. Physiquement il correspond à l'évolution d'une particule soumise au potentiel  $V(x)$  créé par un noyau (pour fixer les idées situé à l'origine) et qui tend assez vite vers zéro pour  $|x| \rightarrow \infty$ . On décompose alors l'espace  $L^2(\mathbf{R}^d)$  en la somme du sous-espace engendré par les fonctions propres correspondantes aux valeurs propres négatives (états liés) et à son complémentaire  $\mathcal{PH}$ . Sur ce sous espace le problème est décrit en terme de déviation (lors de l'interaction avec le noyau) d'une particule évoluant sous l'action d'un hamiltonien libre. Cette démarche porte le nom de *Théorie de la diffusion*. Avec des hypothèses convenables sur le potentiel  $V(x)$  on montre que pour tout  $\varphi \in \mathcal{PH}$  il existe un vecteur  $\varphi_+$  tel que l'on ait :

$$\|e^{-it\frac{-\frac{\hbar^2}{2}\Delta}{\hbar}}\varphi_+ - e^{-it\frac{-\frac{\hbar^2}{2}\Delta+V}{\hbar}}\varphi\| \rightarrow 0 \quad (3.20)$$

lorsque  $t \rightarrow \infty$ .

Mais ceci est équivalent (justement par unitarité du flot quantique) à

$$\|e^{+it\frac{-\frac{\hbar^2}{2}\Delta+V}{\hbar}}e^{-it\frac{-\frac{\hbar^2}{2}\Delta}{\hbar}}\varphi_+ - \varphi\| \rightarrow 0 \quad (3.21)$$

lorsque  $t \rightarrow +\infty$ . C'est à dire à ce que  $e^{+it\frac{-\frac{\hbar^2}{2}\Delta+V}{\hbar}}e^{-it\frac{-\frac{\hbar^2}{2}\Delta}{\hbar}} \rightarrow \Omega_+$  (fortement) pour un certain opérateur  $\Omega_+$ . Cet opérateur est appelé opérateur d'onde. La même construction est bien sûr possible pour  $t \rightarrow -\infty$  et définit un opérateur  $\Omega_-$ .

L'opérateur composé  $W := \Omega_- \Omega_+$  est donc l'opérateur qui permet de passer *d'avant à après* l'interaction et qui décrit la déviation subie par la particule sous l'action du noyau.

### 3.2 L'approximation semiclassique

Comme nous l'avons vu, le fait que la constante de Planck soit très petite a deux conséquences :

- des phénomènes de grandes oscillations
- un nombre de valeurs propres important.

L'asymptotisme à petite valeur de la constante de Planck, c'est à dire quand  $\hbar \rightarrow 0$ , va nous permettre de faire le lien avec les considérations géométriques et dynamiques de la section (2.2).

L'idée générale est la suivante : considérons un opérateur fonction de  $x$  et de  $-i\hbar\partial_x$  (ordonné de la façon que l'on veut). Alors l'action de l'opérateur de différentiation est contrebalancée par la constante de Planck  $\hbar \rightarrow 0$ . La façon d'équilibrer ces deux phénomènes consiste à faire agir les opérateurs sur des fonctions de la forme

$$\psi(x) := a(x)e^{\frac{i\phi(x)}{\hbar}}. \quad (3.22)$$

En effet on remarque aisément que l'action de  $-i\partial_x$  fait "sortir" à l'ordre dominant un terme en  $\frac{1}{\hbar}$  que vient justement contrebalancer le  $\hbar$  de  $-i\hbar\partial_x$ .

Nous allons voir comment différents choix (réels ou complexes) de phases  $\phi$  et d'amplitude  $a$  permettent de retrouver, dans la limite  $\hbar \rightarrow 0$  les différents point de vue concernant la dynamique classique (Hamilton, Liouville, Hamilton-Jacobi) présentés dans la section (2.2).

### 3.2.1 Symboles et quantifications

Les remarques précédentes permettent de faire un lien entre *des opérateurs* et *des fonctions* que sont les hamiltoniens introduits dans la section (2.2). Dans le cas de l'opérateur  $-\frac{1}{2}\Delta + V$ , le hamiltonien correspondant est  $\frac{1}{2}|\xi|^2 + V$ . Le changement de paradigme :

$$\frac{1}{2}|\xi|^2 + V \implies -\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V \quad (3.23)$$

est induit à partir de celui-ci, plus général :

$$(x, \xi) \implies (x, -i\hbar\nabla) \quad (3.24)$$

Grâce à (3.24) on peut espérer *quantifier* des hamiltoniens plus généraux que (3.23), mais le brusque remplacement de  $(x, \xi)$  par  $(x, -i\hbar\nabla)$  présente une ambiguïté due au fait (fondamental pour la mécanique quantique) que,

$$[x_i, -i\hbar\partial_{x_j}] = i\hbar\delta_{ij}$$

c'est à dire que  $x$  et  $-i\hbar\nabla$  ne commutent pas. Une façon de lever cette ambiguïté réside dans le calcul de Weyl (1928).

Considérons une fonction  $h(x, \xi)$  sur  $\mathbf{R}^{2d}$ , par exemple dont toutes les dérivées sont bornées. À  $h$  on peut associer l'opérateur  $H^{Weyl}$

$$h \longrightarrow H^{Weyl}$$

défini par son noyau intégral :

$$H^{Weyl}(y, y') := \int h\left(\frac{y+y'}{2}, \xi\right) e^{i\frac{\xi(y-y')}{\hbar}} \frac{d\xi}{(2\pi\hbar)^d}, \quad (3.25)$$

c'est à dire que  $H^{Weyl}$  agit sur une fonction  $f$  par

$$(H^{Weyl}f)(y) := \int h\left(\frac{y+y'}{2}, \xi\right) e^{i\frac{\xi(y-y')}{\hbar}} f(y') \frac{d\xi dy'}{(2\pi\hbar)^d}.$$

Une telle formule peut être étendue à des classes beaucoup plus larges, en particulier de symboles non bornés. Dans le cas de symboles polynomiaux, les opérateurs correspondants sont des polynômes en  $x$  et  $-i\hbar\nabla$ , et l'ordre est choisi en symétrisant  $x$  et  $-i\hbar\nabla$ . Par exemple :

$$h = x\xi \longrightarrow H^{Weyl} = -i\hbar \frac{x \cdot \nabla + \nabla \cdot x}{2}.$$

On voit immédiatement par la formule (3.25) que

$$h \text{ réel} \implies H^{Weyl} \text{ auto-adjoint (formellement)}$$

D'autres choix sont possibles, par exemple le calcul pseudo-différentiel :

$$h(x, \xi) \longrightarrow H^{\psi D}(y, y') := \int h(y, \xi) e^{i\frac{\xi(y-y')}{\hbar}} \frac{d\xi}{(2\pi\hbar)^d},$$

ou l'antipseudo-différentiel

$$h(x, \xi) \longrightarrow H^{a\psi D}(y, y') := \int h(y', \xi) e^{i\frac{\xi(y-y')}{\hbar}} \frac{d\xi}{(2\pi\hbar)^d}.$$

Le cas *pseudodiff* correspond à mettre les  $\nabla$  à droite, l'*antipseudodiff* à les mettre à gauche.

On peut définir de même des “symboles” pour les fonctions. L'analogue du symbole de Weyl est appelé *fonction de Wigner*. Elle est définie (pour une fonction normalisée  $\psi$ ) comme le symbole de Weyl de l'opérateur de projection sur  $\psi$  divisé par  $(2\pi\hbar)^d$ . Un calcul facile donne la formule qui définit la fonction de Wigner de  $\psi$  :

$$W_\psi(x, \xi) := 2^d \int_{\mathbf{R}^n} \overline{\psi(x-y)} \psi(x+y) e^{2i\frac{\xi \cdot y}{\hbar}} \frac{dy}{(2\pi\hbar)^d}$$

Les propriétés de  $W$  la font ressembler à une densité classique sur l'espace de phases  $\mathbf{R}^{2n}$ , mais un argument essentiel manque :  $W$  n'est pas positive. Nous y reviendrons en détail dans la Section 3.6.

### 3.2.2 WKB, Hamilton-Jacobi et les caustiques

Les considérations précédentes sont valables pour des opérateurs beaucoup plus généraux que  $-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V$ . En effet un calcul à la main (dans le cas d'opérateurs différentiels) ou la formule de la phase stationnaire (dans le cas plus général) donne, dans le cadre de la quantification de Weyl d'un hamiltonien  $h$ , que l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi = H^{Weyl}\psi$$

pour  $\psi$  de la forme (3.22), c'est-à-dire  $\psi(x) = a(x)e^{i\frac{S(x)}{\hbar}}$ ,  $S(x) \in \mathbf{R}$ , est équivalente (modulo  $\hbar$ ) à

$$\begin{aligned} \partial_t S(x, t) + h(x, \nabla S(x, t)) &= 0, & \text{(équation de Hamilton-Jacobi)} \\ \partial_t a(x) + \nabla_\xi h(x, \nabla_x S(x, t)) \cdot \nabla a(x) + (\Delta_x S(x, t))a(x) &= 0, & \text{(équation de transport)} \end{aligned}$$

(il suffit pour cela d'identifier les premiers ordres en  $\hbar$ ). La deuxième équation est (pour  $S(x, t)$  donné et régulier) linéaire et, modulo le terme  $\Delta_x S$ , est l'équation de Liouville (??) associée au champ de vecteurs  $\nabla_\xi h(x, \nabla_x S)$ .

La première équation (celle qui détermine  $S$ ) est une équation de Hamilton-Jacobi comme dans la Section 2.1 où elle a été résolue pour des temps petits en mettant en évidence une variété  $\Gamma$  définie après les formules (2.10) et (2.11). La première équation n'a de solution, a priori, qu'à petit temps, cela a été montré explicitement dans le cas de l'équation de Burger (cf. Section 2). Cela signifie que l'approximation faite cesse d'être valable après un certain temps, alors que l'équation de Schrödinger, elle, continue à avoir une solution régulière, de même que la variété  $\Gamma$  reste parfaitement définie. Il faut donc "prolonger" l'ansatz. Comme cela a été annoncé dans la Section 2, cela se fait de manière complètement différente des prolongements motivés par le contrôle stochastique, la mécanique des fluides ou les limites de solutions de la dynamique KdV. Ce qui se passe peut être compris de façon géométrique, c'est ce que nous allons décrire maintenant sans souci de trop de rigueur.

A toute fonction de la forme (WKB)  $a(x)e^{iS(x,t)/\hbar}$  avec, disons,  $a \in C_0^\infty$  (support compact), est associé le graphe de la fonction  $x \rightarrow \nabla_x S(x, t)$  c'est à dire la variété

$$\Lambda_\phi = \{(x, \nabla_x S(x, t)), x \text{ dans le support de } a\}.$$

Une telle variété est dite lagrangienne, ce qui veut dire que, sur  $\Lambda$  l'intégrale de la 1-forme  $\xi dx$  ne dépend pas du chemin d'intégration (remarquons que la condition que  $\int \xi dx$  ne dépende pas du chemin d'intégration implique bien qu'il existe une fonction  $S$  parfaitement définie (localement) sur  $\Lambda$  telle que  $\xi = \nabla_x S$ , c'est justement ce point-là qui "géométrise" (2.10)). Les caustiques, c'est-à-dire les chocs de l'équation de Hamilton-Jacobi, apparaissent au moment où, propageant  $\Lambda_{S_0}$  par le flot hamiltonien,  $\Lambda_{S_0}^t$  cesse d'être le graphe d'une fonction, c'est à dire se projette mal sur l'axe des  $x$ .

Expliquons comment on procède à une dimension. Considérons un point  $(x_0, \xi_0)$  d'une variété lagrangienne  $\Lambda$  dans le voisinage duquel  $\Lambda$  ne s'écrit pas sous la forme  $\{(x, \nabla_x S(x)), x \in \Omega \subset \mathbf{R}\}$ . On appellera un tel point *caustique*. Il est facile de montrer (en utilisant le fait qu'une courbe se projette toujours bien sur sa tangente) que, dans ce voisinage,

$$\Lambda = \{(\nabla\tau(\xi), \xi), \xi \in \Omega' \subset \mathbf{R}\}$$

pour une certaine fonction  $\tau$ . On peut alors associer à ce bout de variété la fonction  $\tilde{\psi}(\xi) := b(\xi)e^{-i\tau(\xi)/\hbar}$  avec  $b$  à support compact autour de  $\xi_0$ . Prenant la transformée de Fourier de  $\tilde{\psi}$  en  $x \sim x_0$  on obtient une fonction  $\psi$  définie dans un voisinage de  $x_0$ . Si l'on ajoute maintenant à  $\Lambda$  une densité  $\mu : \Lambda \rightarrow \mathbf{C}$ , on associe à  $(\Lambda, \mu)$  la fonction :

$$\psi_{\Lambda\mu}(x) := \left\{ \begin{array}{l} \mu(x, \nabla_x S(x, t))e^{i\frac{S(x,t)}{\hbar}} \text{ en dehors des caustiques,} \\ \int \chi(x, \xi)e^{ix\xi/\hbar} \mu(\nabla\tau(\xi), \xi)e^{-i\frac{\tau(\xi)}{\hbar}} d\xi \text{ pour } \chi \text{ localisée autour de } (x_0, \xi_0). \end{array} \right\}$$

Remarquons qu'une telle fonction est définie modulo une phase constante dans chaque composante hors des caustiques, puisque  $S$  et  $\tau$  sont définies à une constante près. La fonction  $\psi_{\Lambda\mu}$  ne dépend donc pas seulement de  $\Lambda$  et  $\mu$ , mais aussi de ces phases. Nous allons voir qu'un certain choix de celles-ci permet d'avoir un ansatz global pour l'équation de Schrödinger.

Le résultat principal est maintenant le suivant : considérons l'équation de Schrödinger avec pour condition initiale une telle fonction, associée à un couple  $(\Lambda, \mu)$ . Soit  $\Phi^t$  le flot hamiltonien défini par les équations

$$\begin{cases} \dot{x} &= \nabla_{\xi} h(x, \xi) \\ \dot{\xi} &= -\nabla_x h(x, \xi) \end{cases}$$

Définissons  $\Lambda^t := \Phi^t(\Lambda)$  et  $\mu^t := \mu \circ (\Phi^t)^{-1}$

**Proposition 3.1** *soit  $\psi^t$  la solution de l'équation de Schrödinger*

$$i\hbar \partial_t \psi^t = H \psi^t$$

où  $\sigma_{Weyl}(H) = h$ , avec condition initiale :

$$\psi^{t=0} = \psi_{\Lambda\mu}.$$

Alors, pour tout  $t$  fixé, il existe une phase  $\sigma(t)$  telle que

$$\psi^t = e^{i\frac{\sigma(t)}{\hbar}} \psi_{\Lambda^t \mu^t} + o(\hbar)$$

Le choix des changements de phases lors des passages de caustiques (indices de Maslov) est de nature géométrique et ne sera pas discuté ici.

Ce théorème nous indique donc que ce qui se propage est de nature géométrique, et qu'un certain nombre de bizarreries ne sont en fait que des artefacts.

La construction à plusieurs dimensions est du même type, en effectuant, autour des caustiques, des transformées de Fourier partielles dans les directions dans lesquelles  $\Lambda$  se projette mal sur l'axe des  $x$ .

### 3.2.3 États cohérents et équation de Hamilton

Les états cohérents se propagent de façon plus simple que les états WKB. La raison en est que ces états sont localisés en un point de l'espace des phases, et que un point ne voit pas les caustiques, car il se projette toujours bien.

La propagation de tels états ne va pas faire intervenir seulement le flot hamiltonien, mais aussi le flot linéarisé, c'est-à-dire les fluctuations du flot autour d'une trajectoire donnée. C'est là une trace fondamentale du caractère *non-local* de la théorie quantique, et qui perdure à la limite classique.

Rappelons que le flot  $\Phi^t$  est défini par :

$$\dot{\Phi}^t = J \nabla h \circ \Phi^t, \quad \Phi^0 = \text{Id}$$

A chaque point  $(x, \xi)$  on peut définir le flot linéarisé  $d\Phi^t_{(x, \xi)}$ , qui est la matrice des dérivées de  $\Phi^t(x, \xi)$  par rapport à  $(x, \xi)$ . Elle satisfait l'équation :

$$\frac{\partial}{\partial t} d\Phi^t_{(x, \xi)} = J d^2 h(\Phi^t(x, \xi)) d\Phi^t_{(x, \xi)}, \quad d\Phi^0 = \text{Id}. \quad (3.26)$$

Ici  $d^2h(x, \xi)$  est le hessien de  $h$  au point  $(x, \xi)$ .

L'idée générale est que le flot linéarisé va intervenir dans le calcul, et qu'il faut le "quantifier". énonçons le résultat dans le cas simple de paquets d'ondes de forme gaussienne.

**Proposition 3.2** *soit  $\psi_{(p,q)} = \frac{(\text{Det}A)^{1/4}}{(\pi\hbar)^{n/4}} e^{-\frac{\langle x-q, A(x-q) \rangle}{2\hbar}} e^{ip \cdot x/\hbar}$ , avec  $(A + A^*) > 0$ , alors*

$$e^{-it\frac{H}{\hbar}} \psi_{pq}(x) = \frac{(\text{Det}A(t))^{1/4}}{(\pi\hbar)^{n/4}} e^{il(t)/\hbar} e^{i \int_0^t \text{Tr}(\Gamma^s A(s) + i\Lambda^s) ds} e^{-\frac{\langle x-q(t), A(t)(x-q(t)) \rangle}{2\hbar}} e^{ip(t) \cdot x/\hbar} (1 + O(\hbar^{1/2}))$$

avec

$$(q(t), p(t)) := \Phi^t(p, q),$$

$$l(t) = \int_0^t (h(p(s), q(s)) - p(s)\dot{q}(s)) ds$$

et  $A(t)$  satisfait l'équation :

$$i\dot{A}(t) = A(t)\Gamma^t A(t) + 2i\Lambda^t A(t) + \Sigma^t, \quad A(0) = A,$$

les matrices  $\Gamma^t$ ,  $\Lambda^t$  et  $\Sigma^t$ , correspondant à la décomposition du hessien de  $h$  par bloc (sur les  $x$  et  $\xi$ ) :

$$d^2h(\Phi^t(x, \xi)) := \begin{pmatrix} \Gamma^t & \Lambda^t \\ \Lambda^t & \Sigma^t \end{pmatrix},$$

à mettre en relation avec (3.26).

Remarquons que l'on déduit de (3.27) le fait que la relation  $(A + A^*) > 0$  se propage, c'est-à-dire que  $(A(t) + A^*(t)) > 0$  pour tout  $t$ .

La signification de la proposition 3.2 est le fait que la propagation d'états cohérent, à la limite  $\hbar \rightarrow 0$ , définit directement (sans passer par l'équation de Hamilton-Jacobi) le flot hamiltonien classique. Les états cohérents sont très utilisés en optique quantique. Ils permettent aussi la construction de séries de valeurs propres approchées associées des trajectoires périodiques stables de la dynamique classique. Enfin ils fournissent une formulation rigoureuse de l'intégrale de Feynmann (voir Section 3.5).

### 3.2.4 Le théorème d'Egorov

L'action du propagateur sur les observables se fait par la formule (voir plus bas) :

$$e^{+it\frac{H}{\hbar}} \mathcal{M} e^{-it\frac{H}{\hbar}}$$

où  $\mathcal{M}$  est un opérateur dont le symbole de Weyl est  $M$ . C'est là l'équivalent quantique de la composition classique par un flot.

Alors le théorème d'Egorov dit que, pour tout temps et modulo  $\hbar$  (non uniforme dans le temps)

$$e^{+it\frac{H}{\hbar}} \mathcal{M} e^{-it\frac{H}{\hbar}} = \mathcal{M}^t$$



où  $\mathcal{M}^t$  a un symbole de Weyl égal à.

$$M^t = Mo(\Phi^t)^{-1}$$

C'est à dire que l'on a le théorème suivant :

**Théorème 3.3** *Soit  $\mathcal{M}$  un un opérateur borné dont le symbole de Weyl est  $M$  et soit*

$$M(t) = e^{+it\frac{H}{\hbar}} \mathcal{M} e^{-it\frac{H}{\hbar}}$$

*Soit d'autre part  $\mathcal{M}^t$  l'opérateur dont le symbole de Weyl est*

$$M^t = Mo(\Phi^t)^{-1}$$

*alors on a :*

$$\|e^{+it\frac{H}{\hbar}} \mathcal{M} e^{-it\frac{H}{\hbar}} - \mathcal{M}^t\|_{L^2 \rightarrow L^2} \leq C(\hbar, t)$$

*où  $C(\hbar, t)$  désigne une fonction de  $(\hbar, t)$  qui tend uniformément vers zéro pour  $t$  dans un intervalle  $[0, T]$  borné.*

Mentionnons que ce théorème peut être étendu et reste valable pour des temps de l'ordre de  $C \times \log\left(\frac{1}{\hbar}\right)$ , pour  $C$  dépendant des propriétés quantitatives de la sensibilité aux conditions initiales générée par la dynamique classique, c'est à dire que la fonction  $C(\hbar, C \log 1/\hbar)$  tend encore vers 0 lorsque  $\hbar \rightarrow 0$ .

Une des beautés de la théorie asymptotique linéaire réside dans le fait que l'on peut effectuer des calculs à tous les ordres en  $\hbar$ . Cela veut dire que la dynamique quantique, pour des temps pas trop grands, est vraiment très proche de la mécanique classique, proche à tout ordre en  $\hbar$  lorsque  $\hbar \rightarrow 0$ .

Ces développements prennent un sens grâce à la définition de série asymptotique suivante.

On dira qu'une fonction  $f(\hbar)$  définie dans un voisinage de l'origine, admet le développement asymptotique  $\sum_{j=0}^{\infty} c_j \hbar^j$ , ou que la fonction est asymptotique à la série  $\sum_{j=0}^{\infty} c_j \hbar^j$ , et l'on écrira  $f(\hbar) \sim \sum_{j=0}^{\infty} c_j \hbar^j$  si

$$\forall n \in \mathbf{N}, \exists C_n, h_n / \forall \hbar < h_n, |f(\hbar) - \sum_{j=0}^{n-1} c_j \hbar^j| \leq C_n \hbar^n$$

sans aucun contrôle sur les  $C_n$ . Les développements semiclassiques sont donc des séries asymptotiques infinies en  $\hbar$ .

### 3.3 Théorie des perturbations et formes normales

Dans cette courte section nous voudrions présenter quelques résultats concernant la théorie des perturbations, qui a été très importante pour le succès de la théorie quantique.

Mentionnons tout d'abord que les méthodes de l'analyse fonctionnelle permettent d'assurer la stabilité par perturbation de considérations telles que le caractère autoadjoint, qualité du spectre etc.

Le résultat fort est le théorème de Kato-Rellich que l'on peut exprimer ainsi dans une version simplifiée.

**Théorème 3.4** Soit un opérateur (fermé) de la forme  $H(\epsilon) = H_0 + \epsilon V$  avec  $H_0$  autoadjoint, tel que le domaine de  $H_0$  soit inclus dans celui de  $V$  et tel qu'il existe deux constantes positives  $a$  et  $b$  telles que, pour tout  $\psi$  dans le domaine de  $H_0$ , on ait :

$$\|V\psi\| \leq a\|H_0\psi\| + b\|\psi\|. \quad (3.27)$$

Alors l'opérateur  $H(\epsilon)$  de domaine  $D(H(\epsilon)) = D(H_0)$  est aussi auto adjoint. De plus si  $E_0$  est une valeur propre non-dégénérée (c'est-à-dire que le sous-espace propre associé est monodimensionnel) dans le spectre discret de  $H_0$ , il y a exactement, pour  $\epsilon$  suffisamment petit, une valeur propre  $E(\epsilon)$  de  $H(\epsilon)$  près de  $E_0$ , et elle est non-dégénérée.

Le spectre discret non-dégénéré est donc stable par perturbation (ce résultat s'étend au cas de dégénérescence finie). La théorie de Rayleigh-Schrödinger permet de calculer le développement asymptotique en  $\epsilon$  de cette valeur propre (non-dégénérée)

$$E(\epsilon) \sim E_0 + \sum_{k=1}^{\infty} c_k \epsilon^k.$$

On peut donner les premiers coefficients.

$$c_1 = \langle \psi_0 | V | \psi_0 \rangle$$

où  $\psi_0$  est le vecteur propre correspondant à  $E_0$ . Si l'on note plus généralement  $E^j$  et  $\psi_j$  les valeurs/vecteurs propres de  $H_0$  (supposé de spectre strictement discret, comme dans l'exemple 2 de la Section 3.1.3) on a

$$c_2 = \sum_{E^k \neq E_0} \frac{\langle \psi_0, V \psi_k \rangle \langle \psi_k, V \psi_0 \rangle}{E^k - E_0}.$$

Dans le cas de l'oscillateur harmonique  $H_0 = \frac{1}{2}(-\hbar^2 \Delta + x^2)$  les valeurs propres sont  $E^j = (j + 1/2)\hbar$  et donc on voit que, a priori, le coefficient  $c_2$  explose quand  $\hbar \rightarrow 0$ . Mais en fait il n'en est rien, et un phénomène de "cancellations" permet de montrer que, si l'on considère une valeur propre non-perturbée  $E_0 = E^n$  alors, dans la limite

$$\hbar \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty, \quad n\hbar \rightarrow A \in \mathbf{R},$$

tous les coefficients  $c_k$  ont une limite, et définissent, à la limite, une série  $\sum \epsilon^k c_k(A)$ . Cette série s'identifie à la série de Birkhoff classique bien connue dans la théorie des systèmes dynamiques. On montre aussi que dans le cas où l'opérateur perturbé a un spectre discret on obtient ainsi une bonne approximation des valeurs propres.

Les méthodes perturbatives ne s'appliquent pas seulement au cas où l'on perturbe un opérateur globalement par la présence d'un " $\epsilon$ ". Elle permettent aussi de traiter des cas où l'on est proche localement d'une situation connue. Considérons par exemple le spectre d'un opérateur de Schrödinger près du fond d'un puits de potentiel. Dans ce cas l'opérateur est

$$-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + V(x)$$

et

$$V(x) \sim x^2 + ax^3 + bx^4 + \dots,$$

et si l'on considère la partie du spectre près de 0, on s'attend à ce que les termes cubiques et d'ordres plus élevés n'interviennent pas à l'ordre dominant. C'est en effet le cas et l'on montre que, dans le cas où 0 est un minimum absolu du potentiel, la partie basse du spectre, lorsque  $\hbar \rightarrow 0$ , est de la même forme qu'un oscillateur harmonique

$$\left\{ \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \right\}_{(n=0,1,\dots \text{ pas trop grand})}.$$

En fait la bonne façon de regarder ce problème est la théorie des *formes normales* qui, classiquement assure que l'on peut trouver un changement de variables  $(x, \xi) \rightarrow (x', \xi')$  tel que, près de  $(x, \xi) = 0$ ,

$$\frac{\xi^2}{2} + V(x) = \frac{\xi'^2}{2} + x^2 + \alpha \left( \frac{\xi'^2}{2} + x^2 \right)^2 + \beta \left( \frac{\xi'^2}{2} + x^2 \right)^3 + \dots,$$

et quantiquement fournit un opérateur unitaire  $U$  tel que (pour la partie basse du spectre) on ait

$$U^{-1} \left( -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + V(x) \right) U = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + x^2 + \alpha \left( -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + x^2 \right)^2 + \beta \left( -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + x^2 \right)^3 + \dots,$$

et donc que la partie basse du spectre soit donnée par les nombres :

$$\left( j + \frac{1}{2} \right) \hbar + \alpha \left( \left( j + \frac{1}{2} \right) \hbar \right)^2 + \beta \left( \left( j + \frac{1}{2} \right) \hbar \right)^3 + \dots$$

La théorie est plus générale et s'applique aussi au voisinage de trajectoires périodiques stables. Ainsi, au voisinage de telles trajectoires et sous une hypothèse d'indépendance rationnelle des valeurs propres du flot linéarisé évalué à la période de la trajectoire (application de Poincaré), on peut trouver un opérateur unitaire qui conjugue le hamiltonien à une forme normale sur  $L^2(S_1 \times \mathbf{R}^{d-1})$  de la forme :

$$U^{-1} H U \sim_{\text{au voisinage de } \gamma} F \left( -i\partial_\theta, -\hbar^2 \partial^2 x_1 + x_1^2, \dots, -\hbar^2 \partial^2 x_{d-1} + x_{d-1}^2 \right). \quad (3.28)$$

Nous n'entrerons pas ici dans la signification précise de  $\sim_{\text{au voisinage de } \gamma}$ , mais disons que (3.28) est "vraie" dans une partie de l'espace de Hilbert correspond à des vecteurs "localisés en espace de phases" (dans un sens qui peut être formalisé rigoureusement) près de  $\gamma$ . L'exemple typique de tels vecteurs sont des états cohérents  $\psi_{x\xi}$  avec  $(x, \xi)$  dans un voisinage de  $\gamma$ . Le spectre du membre de droite est alors de la forme

$$\left\{ F(k\hbar, (n_i + 1/2)\hbar, \dots, (n_{d-1} + 1/2)\hbar) \right\}_{k \in \mathbf{Z}, n_i \in \mathbf{N} \text{ pas trop grands}}$$

et constitue une partie (approximative) du spectre total de  $H$ .

Une telle construction permet donc de calculer une partie du spectre de  $H$ , mais une partie seulement, et l'on peut montrer que cette partie est petite par rapport à tout le spectre, surtout à la limite  $\hbar \rightarrow 0$ . Elle correspond à la partie du spectre de  $H$  dont les vecteurs propres sont localisés près de  $\gamma$ .

La plupart des valeurs propres sont donc données par des vecteurs propres qui se ne laissent pas bien localiser près de trajectoires fermées classiques. Signalons que l’aspect stables des trajectoires est ici crucial, mais que des fonctions propres localisées près de trajectoires instables a été observée numériquement (“scars”), sans avoir de justification théorique satisfaisante. Les seuls résultats mathématiques “vont dans l’autre sens” : la norme  $L^2$  près des trajectoires instables de toutes les fonctions propres décroît (logarithmiquement) lorsque  $\hbar \rightarrow 0$ .

Signalons enfin que, lorsque le système classique sous-jacent est *intégrable* on peut construire des quasimodes associés aux tores invariants par la dynamique classique. On peut donc donner la liste (hélas bien trop brève) des cas où l’on sait associer précisément une valeur propre à une construction donnée :

- les systèmes à un degré de liberté
- certains systèmes ”exacts” (oscillateur harmonique, atome d’hydrogène, potentiel de Morse)
- les perturbations de ces derniers
- les systèmes (classiquement ou quantiquement) intégrables
- les voisinages de points fixes (elliptiques) et de trajectoires périodiques stables.

La pauvreté de cette liste motive aisément la section suivante, dans laquelle nous allons montrer comment, dans la limite où  $\hbar \rightarrow 0$ , en relâchant un peu la précision, c’est-à-dire en calculant des moyennes spectrales, les propriétés fines du flot classique sous-jacent vont apparaître..

### 3.4 Formule des traces, ergodicité des fonctions propres

Comme nous avons vu au début de cette section l’équation de Schrödinger dépendant du temps (évolution) et celle aux valeurs propres sont intimement liées. En général le problème aux valeurs propres est difficile, et rares sont les cas où l’on peut le résoudre, souvent même numériquement.

Nous allons nous placer, sans entrer dans les détails techniques, dans un cadre plus général que celui des hamiltoniens de type “Schrödinger” ( $-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V$ ) et considérer un opérateur donné par un symbole de Weyl  $h$  comme dans la Section 3.2.1. Le choix de la classe de symboles est délicat, spécialement lorsque l’on se place sur  $\mathbf{R}^d$  (la théorie est plus facile sur une variété compacte) et nous ne l’aborderons pas ici. Il suffira au lecteur de penser que la classe des symboles polynomiaux, qui donne des opérateurs différentiels, convient. En revanche la discussion concernant la qualité du spectre (discret etc) pour des symboles quelconques, et que nous avons décrites dans les 3 exemples de la Section 3.1.3 pour des opérateurs de Schrödinger, se ramène à la proposition suivante.

**Proposition 3.3** *soit un opérateur  $H$  de symbole de Weyl  $h$  et soient  $E_1 < E_2 \in \mathbf{R}$ . Supposons qu’il existe  $\epsilon$  tel que*

$$\int_{h^{-1}([E_1-\epsilon, E_2+\epsilon])} dx d\xi < +\infty. \quad (3.29)$$

*Alors  $\exists \hbar_\epsilon$  tel que, pour  $\hbar < \hbar_\epsilon$  on ait :*

$$\text{spectre}(H) \cap [E_1, E_2] \subset \text{spectre}_{\text{discret}}(H)$$

Le lecteur pourra aisément vérifier que dans le cas Schrödinger cela correspond bien aux exemples donnés plus haut.

Dans toute cette section on supposera que, soit le spectre de  $H$  est purement discret, soit on s'intéresse à une partie du spectre qui ne contient que des valeurs propres grâce à des hypothèses du type de celle de la proposition 3.3.

La formule des traces donne de l'information non pas sur chaque valeur propre individuellement, mais sur leur ensemble, par des moyennes.

Nous allons donc nous intéresser à des expressions du type  $\sum_j f_{\hbar}(E_j - E)$ , où  $f_{\hbar}$  est une fonction moyennisant à une échelle  $\hbar$ -dépendante et  $E$  est la valeur moyenne de l'énergie.

Le premier exemple consiste à prendre  $f_{\hbar}$  indépendante de  $\hbar$  et  $C^\infty$  (à support compact par exemple et, si nécessaire, suffisamment petit et contenu dans un intervalle  $]E + E_1 - \epsilon, E + E_2 + \epsilon[$  tel que (3.29) soit satisfaite). Alors (en utilisant la Proposition 3.3)

$$\text{Trace} f(H - E) = \sum_j f_{\hbar}(E_j - E).$$

Le calcul pseudodifférentiel montre aisément que  $f(H - E)$  est un opérateur pseudodifférentiel, et la formule (3.36) permet immédiatement d'évaluer sa trace. On obtient, à l'ordre dominant en  $\hbar$ ,

$$\sum_j f_{\hbar}(E_j - E) \sim \int_{\mathbf{R}^{2n}} f(h(x, \xi) - E) dx d\xi,$$

où  $h$  est le symbole principal de  $H$ . *Encore une fois observons que si  $h(x, \xi)$  ne tend pas vers l'infini lorsque  $x$  ou  $\xi$  tendent vers l'infini, le membre de droite de cette formule risque fort d'être infini*

On peut, par des théorèmes taubériens, relâcher la condition  $C^\infty$  et, en prenant pour  $f$  la fonction caractéristique de l'intervalle  $] - c, +c[$ , obtenir le résultat :

$$\#\{E_j \in ] - c, +c[\} = \int_{E - c \leq h(x, \xi) \leq E + c} dx d\xi + o(1). \quad (3.30)$$

Il est facile d'étendre ces résultats au cas où  $f_{\hbar} = f(\frac{\cdot}{\hbar^\alpha})$  avec  $0 \leq \alpha < 1$ , les termes dominants ne changeant pas, mais un changement brutal s'opère lorsque  $\alpha = 1$ . En effet, en prenant la transformée de Fourier  $\tilde{f}$  de  $f$ , on obtient, formellement,

$$\sum_j f_{\hbar}(E_j - E) := \sum_j f\left(\frac{E_j - E}{\hbar}\right) = \int \text{Trace} \left( e^{\frac{sH}{\hbar}} \right) e^{-i \frac{sE}{\hbar}} \tilde{f}(s) ds$$

c'est-à-dire que le propagateur  $e^{-i \frac{sE}{\hbar}}$  apparaît, qui n'a plus rien d'un opérateur pseudodifférentiel. La formule des traces permet néanmoins de calculer les moyennes spectrales considérées.

Dans sa formulation initiale, non rigoureuse, La formule des traces exprime la trace de la résolvante comme somme sur les trajectoires périodiques d'expressions faisant intervenir des caractéristiques de ces dernières.

Plus précisément elle exprime que le spectre de l'opérateur (supposé purement discret),  $\{E_j\}_{j=1,2,\dots}$  vérifie la relation :

$$\sum \frac{1}{E_j - E} = \frac{C_n}{\hbar^n} + \frac{C_{n-1}}{\hbar^{n-1}} \cdots + \frac{C_2}{\hbar^2} + \frac{1}{\hbar} \sum_{\gamma} \frac{T_{\gamma} e^{i(S_{\gamma}/\hbar + \sigma_{\gamma})}}{\sqrt{\det(1 - P_{\gamma})}} + O(1) \quad (3.31)$$

où les  $C_n$  sont des constantes et où la somme est sur toutes les trajectoires périodiques d'énergie  $E$  et où pour chaque telle  $\gamma$  ;

- $T_\gamma$  est la période de  $\gamma$
- $S_\gamma$  est l'action de  $\gamma$ , c'est à dire  $S_\gamma = \int_\gamma pdq$ .
- $\sigma_\gamma$  est un indice, relié au phases de la Proposition 3.1
- $P_\gamma$  est l'application de Poincaré de  $\gamma$ , essentiellement l'application  $d\Phi_{x\xi \in \gamma}^{T_\gamma}$  définie elle aussi dans la Section 3.2.3.

Le problème de la formule (3.31) est que les deux membres, de droite et de gauche, ne sont pas bien définis : celui de droite si  $E_j = E$ , celui de gauche car la somme est infinie et ne converge pas en général. Il faut donc régulariser cette formule et lui donner un sens. Ce sera fait en utilisant une fonction test  $\varphi$ , dont la transformée de Fourier est supportée dans un compact. On a alors le résultat général

**Théorème 3.5** *Soit  $\varphi$  une fonction de Schwartz dont la transformée de Fourier a un support compact, soit  $H$  un opérateur dont le symbole de Weyl est  $h$ . Soit  $E$  une valeur régulière de  $h$  et supposons que le spectre de  $H$  contenu dans l'intervalle  $]E - \epsilon, E + \epsilon[$  soit purement discret. Soient  $E_j(\hbar)$  et  $\varphi_j(\hbar)$  les valeurs propres et les vecteurs propres correspondants. Soit  $B$  une observable de symbole de Weyl  $b(x, \xi)$ . Alors il existe un développement asymptotique de la forme*

$$\begin{aligned} \sum_j \varphi \left( \frac{E_j(\hbar) - E}{\hbar} \right) \langle \varphi_j, B\varphi_j \rangle \sim & \\ & \left( \hat{\varphi}(0) \frac{\int_{\Sigma_E} b(x, \xi) d\mu^L}{(2\pi)^{n-1}} \hbar^{-(n-1)} + \sum_{k=-n+2}^{+\infty} c_k(\hat{\varphi}) \hbar^k \right) + \\ & \sum_\gamma \left( \hat{\varphi}(T_\gamma) \frac{e^{i(S_\gamma/\hbar + \sigma_\gamma)}}{\sqrt{|\det(1 - P_\gamma)|}} \int_0^{T_\gamma^\#} b(x(t), \xi(t)) dt + \sum_{j=1}^{\infty} d_j^\gamma(\hat{\varphi}) \hbar^j \right). \end{aligned} \quad (3.32)$$

Où :

- $d\mu^L$  est la mesure de Liouville sur  $\Sigma_E = \{(\xi, x); h(\xi, x) = E\}$ , c'est à dire que  $d\mu^L dE = dpdq$ ,
- $\gamma$  est une trajectoire de  $h(\xi, x)$  sur  $\Sigma_E$  de période  $T_\gamma$  dans le support de  $\hat{\varphi}$  ( transformée de Fourier de  $\varphi$ ),
- les  $c_k(\cdot)$  sont des distributions à support dans  $\{0\}$ ,
- les  $d_j^\gamma(\cdot)$  sont des distributions à support dans  $\{T_\gamma\}$ .

On voit donc dans cette formule que le terme dominant est régulier, alors que les termes faisant intervenir les périodes non nulles (qui est d'ordre inférieur) sont oscillants.

A partir de la formule des traces et de théorèmes taubériens on obtient des informations beaucoup plus précises que (3.30) : on obtient des estimations sur le nombre de valeurs propres dans un intervalle plus petit, d'ordre  $\hbar$ . On peut ainsi calculer le terme dominant de la fonctions de comptage suivante : soit

$$N(\hbar) := \#\{E_j \in [E - c\hbar, E + c\hbar]\}$$

et soit

$$\mu^L(\Sigma_E) := \int_{h(p,q)=E} dpdq$$

alors pour une valeur régulière  $E$  de  $h$  on a :

$$N(\hbar) = 2c \times \frac{\mu^L(\Sigma_E)}{(2\pi)^n} \hbar^{-(n-1)} + o(\hbar^{-(n-1)})$$

Cette formule peut être étendue au cas où  $E$  n'est plus une valeur régulière de  $h$ , C'est à dire lorsque le gradient de  $h$  s'annule quelque part sur  $\Sigma_E$ . Dans tous les cas le principe de Heisenberg joue :

$$\#\{E_j \in [E - c\hbar, E + c\hbar]\} \sim \frac{\text{Vol}(\Omega_c^E)}{(2\pi\hbar)^n}$$

où

$$\Omega_c^E := \{(p, q) / E - c\hbar \leq h(p, q) \leq E + c\hbar\}$$

C'est à dire que le nombre d'états est donné en en plaçant un par volume  $(2\pi\hbar)^n$

En particulier, lorsque la variété de points singuliers est de dimension maximale on obtient un ordre dominant logarithmique.

Une autre application de la formule des traces est le théorème de Schnirelman sur l'ergodicité des fonctions propres.

**Proposition 3.4** *Supposons que  $\phi^t$  soit ergodique sur  $\Sigma_E$ ; alors il existe un sous-ensemble de densité un  $\{\epsilon_j\}$  de valeurs propres dans  $[E - c\hbar, E + c\hbar]$  tel que, si  $\varphi_{\epsilon_j}$  sont les vecteurs propres correspondant,*

$$\langle \varphi_{\epsilon_j}, A\varphi_{\epsilon_j} \rangle \longrightarrow \frac{\int_{\Sigma_E} a d\mu^L}{\int_{\Sigma_E} d\mu^L} \quad \text{as } \hbar \rightarrow 0.$$

Rappelons qu'un flot est ergodique si, pour toute fonction  $a$  on a :

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^T a \circ \phi^t dt = \frac{\int_{\Sigma_E} a d\mu^L}{\int_{\Sigma_E} d\mu^L}$$

presque partout sur  $\Sigma_E$ .

Il y a aussi une version de ce résultat dans le cas où  $E = E_c$  n'est pas une valeur régulière du hamiltonien.

L'intérêt de la proposition précédente réside dans le fait que c'est le seul résultat disponible concernant les propriétés des fonctions propres de hamiltoniens quantiques associés à des dynamiques classiques chaotiques. Elle est aussi en accord avec l'idée naturelle que, une fonction propre, étant par hypothèse un état *stationnaire* pour la dynamique quantique, ses propriétés de localisation dans l'espace de phases doivent "envahir", sous l'hypothèse ergodique, tout l'espace disponible.

### 3.5 Intégrale de Feynman

La formule de Feynman-Kac, que nous verrons dans la Section 6.3, exprime la solution de l'équation

$$\partial_t u - \frac{1}{2} \Delta u + Vu = 0$$

par l'intermédiaire de la mesure de Wiener. L'idée originelle de Feynman était d'exprimer par une telle intégrale la solution de l'équation de Schrödinger

$$i\partial_t\psi = (-\Delta + V)\psi.$$

La différence entre ces deux équations réside bien sûr dans le nombre complexe  $i$ , et si l'on essaie de construire une mesure de Wiener en remplaçant  $t$  par  $it$  la construction s'effondre.

Les états cohérents permettent néanmoins de construire une telle représentation du propagateur quantique en utilisant un processus brownien dans  $\mathbf{R}^{2n}$ , espace des phases, dans la limite d'une grande constante de diffusion.

On définit ainsi une mesure de Wiener  $dB^\nu$  sur  $\mathbf{R}^{2n}$  par le même procédé que dans le paragraphe 6.3, mais en renormalisant le laplacien par une constante  $\frac{1}{\nu}$ . Cela veut dire que plus  $\nu$  est grand moins les aspects diffusifs, qui font que la construction du paragraphe 6.3 marche, sont présents. La limite formelle  $\nu \rightarrow \infty$  correspond au passage de la mesure de Wiener à la mesure de Lebesgue en dimension infinie...qui n'existe pas.

Etant donné un symbole (hamiltonien)  $h$  on associe à tout chemin  $(x(s), \xi(s)) [0, t] \rightarrow \mathbf{R}^{2n}$  l'action lagrangienne définie par :

$$\int (\xi dx - h(x(s), \xi(s)) ds)$$

Une telle intégrale n'est en principe définie que sur les chemins différentiables, mais le calcul de Stratonovich permet de donner un sens à :

$$\int e^{i \int (\xi dx - h(x(s), \xi(s)) ds)} dB_\nu^{(x_1, \xi_1), (x_2, \xi_2)}.$$

où  $dB_\nu^{(x_1, \xi_1), (x_2, \xi_2)}$  est la mesure  $dB_\nu$  restreinte aux chemins dont les extrémités sont  $x$  et  $\xi$ , c'est à dire tels que  $(x(0), \xi(0)) := (x_1, \xi_1)$  et  $(x(t), \xi(t)) := (x_2, \xi_2)$ .

L'ingrédient fondamental est ici la notion d'état cohérent que nous avons rencontré plus haut, et que nous utiliserons ici à  $\hbar = 1$ , car le résultat est EXACT. On définit donc

$$\psi_{(x, \xi)}(y) = e^{-\frac{(y-x)^2}{2\hbar}} e^{i\xi \cdot y/\hbar}$$

et (pour une classe raisonnable de symboles  $h$  que nous ne précisons pas ici) l'opérateur défini par

$$H\phi(y) = \int : h(x, \xi) (\psi_{(x, \xi)}, \phi) \psi_{(x, \xi)}(y) dx d\xi.$$

Le résultat exprime le "noyau intégral" du propagateur dans la "base" des états cohérents :

$$\langle \psi_{x_1, \xi_1}, e^{itH^{Top}(x, D_x)} \psi_{x_2, \xi_2} \rangle = \lim_{\nu \rightarrow \infty} e^{\nu t} \int e^{i \int (\xi dx - h(x(s), \xi(s)) ds)} dB_\nu^{(x_1, \xi_1), (x_2, \xi_2)}.$$

où le hamiltonien  $H^{Top}$  est le quantifié de  $h$  par la formule de quantification de Töplitz vue plus haut.

Nous voyons dans cette formule le rêve de Feynman réalisé. En effet l'idée que le propagateur quantique est obtenu en sommant sur toutes les chemins l'exponentielle (oscillante) contenant l'action



lagrangienne de chaque chemin est bien exprimée ici, dans un sens faible : on a bien après voir régularisé avec Wiener, retrouvé, par la limite de grande constante de diffusion, après intégration, une intégrale sur TOUS les chemins.

### 3.6 Equation de Von Neumann et équation de Schrödinger non linéaire

De la même façon que l'on définit des symboles pour des opérateurs, on peut définir de même des "symboles" pour les fonctions. L'analogie du symbole de Weyl est appelé *fonction de Wigner* et nous l'avons déjà définie dans la Section 3.2.1. Elle est définie (pour une fonction de normalisée  $\psi$ ) comme le symbole de Weyl de l'opérateur de projection sur  $\psi$ . Un calcul facile donne la formule qui définit la fonction de Wigner de  $\psi$  :

$$W_\psi(x, \xi) := 2^n \int_{\mathbf{R}^n} \overline{\psi(x-y)} \psi(x+y) e^{2i\xi \cdot y/\hbar} \frac{dy}{(2\pi\hbar)^n}$$

Les propriétés de  $W$  la font ressembler à une densité classique sur l'espace de phases  $\mathbf{R}^{2n}$ , mais un argument essentiel manque :  $W$  n'est pas positive.

Signalons trois propriétés remarquables de  $W_\psi$  :

$$\int W_\psi(x, \xi) d\xi = |\psi(x)|^2, \quad (3.33)$$

$$\int W_\psi(x, \xi) dx = |\hat{\psi}(\xi)|^2, \quad (3.34)$$

$$\int W_\psi(x, \xi) dx d\xi = \|\psi\|_{L^2}^2 \quad (3.35)$$

et remarquons que la première équation est une représentation de  $|\psi(x)|^2$  comme intégrale d'une (malheureusement non positive) "densité" sur la variable  $\xi$

Bien entendu ces propriétés se transposent au cas où  $W$  est le symbole de Weyl d'un opérateur quelconque de noyaux  $B(x, y)$  selon la formule

$$W_B(x, \xi) = 2^n \int_{\mathbf{R}^n} B((x+y), (x-y)) e^{2i\xi \cdot y/\hbar} \frac{dy}{(2\pi\hbar)^n}$$

avec en particulier pour un opérateur à trace la relation :

$$\int W^B(x, \xi) dx d\xi = \text{Trace} B. \quad (3.36)$$

La transformation de Wigner permet une première formulation de la relation entre l'équation de Von Neuman (Liouville quantique) et l'équation de Liouville classique lorsque  $\hbar \rightarrow 0$

Remarquons tout de suite que l'équation de Schrödinger est équivalente (modulo une phase globale) à l'équation de Heisenberg-von Neumann :

$$i\hbar \partial_t B_\hbar = \left[ -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + V(x), B_\hbar \right] \quad (3.37)$$

En effet un calcul élémentaire montre que, si  $\psi^t$  satisfait l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi^t(x) = \left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V(x)\right)\psi^t(x),$$

alors le projecteur sur  $\psi^t$ ,  $|\psi^t\rangle\langle\psi^t|$  satisfait bien :

$$i\hbar\partial_t|\psi^t\rangle\langle\psi^t| = \left[-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V(x), |\psi^t\rangle\langle\psi^t|\right].$$

pour un opérateur  $B_h$  hermitien quelconque la transformée de Wigner de l'équation :

$$i\hbar\partial_t B_h = \left[-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V(x), B_h\right] \quad (3.38)$$

donne pour  $W_h^B$  l'équation

$$\partial_t W_h^B + \xi \cdot \nabla_x W_h^B + K_h *_{\xi} W_h^B = 0 \quad (3.39)$$

$$K_h := \frac{i}{(2\pi)^n} \int_{\mathbf{R}^n} e^{-i\xi y} \left( \frac{V(x + \hbar y/2) - V(x - \hbar y/2)}{\hbar} \right) dy. \quad (3.40)$$

Et on observe que (dans le cas où  $V(x)$  est régulier c'est immédiat en utilisant son développement de Taylor) que l'on a au moins formellement

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} K_h *_{\xi} W_h^B = -\nabla_x V \cdot \nabla_{\xi} (\lim_{\hbar \rightarrow 0} W_h^B)$$

On retrouve bien pour la limite

$$W(x, \xi) = \lim_{\hbar \rightarrow 0} W_h^B(x, \xi)$$

l'équation de Liouville classique.

$$\partial_t W(x, \xi, t) + \xi \nabla_x W(x, \xi, t) - \nabla_x V(x) \cdot \nabla_{\xi} W(x, \xi, t) = 0. \quad (3.41)$$

Les considérations générales sur la mécanique quantique que nous avons jusqu'ici énoncées dans le cadre linéaires se généralisent au cas non-linéaire de la façon suivante.

Sous des hypothèses convenables des généralisations du théorème de Stone permettent en effet de considérer des équations de Schrodinger avec un potentiel  $V(x, t, \Psi)$  toujours réel mais dépendant du temps ou même de la fonction d'onde  $\Psi$

$$i\hbar\partial_s \Psi = H_h \Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V(x, t, \Psi)\right)\Psi.$$

La dépendance du temps apparaît dans des problèmes de contrôle où l'on essaye de modifier l'état d'un système par un champ extérieur. Les équations non linéaires les plus classiques sont :

$$i\hbar\partial_s \Psi = H_h \Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta \pm |\Psi|^{\alpha}\right)\Psi$$

ou les équations de “champ moyen” (terminologie qui sera justifiée dans la Section 10)

$$i\hbar\partial_s\Psi = H_\hbar\Psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + \int V(x-y)|\Psi(y)|^2 dy\right)\Psi$$

Ces équations interviennent non seulement (cf Section 10) dans des approximations de dynamique impliquant un grand nombre de particules mais aussi dans des problèmes de propagation d’ondes classiques sans rapport avec la mécanique quantique.

On peut observer que, en prenant pour  $V(x)$  une masse de Dirac à l’origine, l’équation (3.42) coïncide avec l’équation (3.42) avec  $\alpha = 2$  tandis qu’en dimension 3 d’espace avec

$$V(x) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{|x|}$$

le potentiel apparaissant dans (3.42) est la charge  $q(x, t)$  donnée par la loi de l’électrostatique

$$-\Delta q = |\Psi(x)|^2.$$

Dans les équations (3.42) et (3.42) la non linéarité n’intervient que par l’intermédiaire  $|\Psi(x)|^2$ . Cette remarque permet d’étendre l’équation de von Neuman au cadre non-linéaire. Ainsi on obtient pour l’opérateur  $B(t)$  (de noyau également noté  $B(t, x, y)$ ) l’équation :

$$i\hbar\frac{dB}{dt} = \left[-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V \star B(t, x, x)\right], B(t_0) = B_{t_0},$$

où  $\star$  désigne la convolution. On observe que l’équation (3.42) peut s’écrire pour tout opérateur  $B(t, x, x)$  autoadjoint et donc en particulier pour toute matrice densité (nom donné dans la théorie quantique aux opérateurs autoadjoints positifs de trace 1). Comme pour les matrices, un opérateur autoadjoint de trace 1 se diagonalise (cela sera évoqué ci dessous) sous la forme :

$$B(t, x, y) = \sum_j \lambda_j(t) \phi_j(x, t) \overline{\phi_j(y, t)} \text{ avec } 0 \leq \lambda_j(t), \sum_j \lambda_j(t) = 1$$

de plus comme les  $B(t)$  sont déduits de  $B(0)$  par transformation unitaire les  $\lambda(t)$  sont en fait indépendants de  $t$ . Ainsi pour de telles matrice densité la dynamique donnée par (3.42) prend la forme

$$\begin{aligned} B(x, y, t) &= \sum_j \lambda_j \phi_j(x, t) \overline{\phi_j(y, t)}, \int_{\mathbf{R}^d} \phi_j(x, t) \overline{\phi_k(x, t)} dx = \delta_{jk} \\ i\hbar\frac{dB(x, y, t)}{dt} &= \left[-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + V \star \sum_j \lambda_j |\phi_j(x, t)|^2\right], B(t), \\ B(x, y, 0) &= \sum_j \lambda_j \phi_j(x, 0) \overline{\phi_j(y, 0)} \end{aligned} \tag{3.42}$$

En particulier à partir de l’équation (3.42) on obtient l’équation :

$$i\hbar\frac{dB(x, y, t)}{dt} = \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2}\Delta + \int_{\mathbf{R}^n} V(x-y)B(y, y, t)dy\right), B(x, y, t)\right]$$

Les équations (3.38) dans le cas linéaire et (3.42),(3.42), (3.43) dans le cas non linéaire sont des analogues quantiques formels de Liouville classique (2.5). On parle ainsi d'équation de Liouville quantique.

Le calcul formel, qui nous a permis de dériver l'équation de Liouville (3.43), est bien entendu valable lorsque  $V$  dépend de  $B(x, x)$ . En particulier appliqué à l'équation (3.43) il donne pour la limite les équations de Vlasov classiques :

$$\partial_t W(x, \xi, t) + \xi \nabla_x W(x, \xi, t) - \nabla_x \left( \int_{\mathbf{R}^d_\xi} V(x-y) W(x, \xi') d\xi' \right) \cdot \nabla_\xi W(x, \xi, t) = 0 \quad (3.43)$$

**Remarque 3.1** *Les démonstrations de convergence (dans les cas linéaires et non linéaires y compris coulombien) se basent sur les estimations a priori uniforme. Dans ce cadre pour avoir des solutions non triviales il est indispensable de considérer des états mixtes donc des données initiales (et des solutions) de la forme :*

$$B(x, t) = \sum_j \lambda_j \phi_j(x, t) \overline{\phi_j(y, t)} \quad 0 \leq \lambda_j, \quad \sum_j \lambda_j = 1$$

*Dans le cas linéaire ( $V(x)$  indépendant de  $B$ ) cela se fait simplement en superposant des solutions de la forme  $\phi_j(x, t) \overline{\phi_j(y, t)}$ . Par contre dans le cas de l'équation (3.43) cette hypothèse se justifie par le fait que l'équation (3.42) est obtenue comme approximation d'un système de  $N$  particules dans lequel chacune des particules est soumise à au champ moyen créé par les autres... (cf Section 10). Le passage donc à un champ moyen au niveau de l'équation de Von Neumann est donc cohérent avec ce régime.*

## 4 Le Laplacien dans l'espace entier ou dans un domaine avec frontières

### 4.1 Introduction au laplacien

Dans  $\mathbf{R}^n$  on désigne par laplacien l'opérateur

$$\Delta = \sum_{1 \leq i \leq n} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$$

Cet opérateur déjà introduit comme élément essentiel de l'équation de Schrödinger apparaît aussi en géométrie, en physique (en plus de la physique quantique, dans la description de phénomènes macroscopiques) etc... ceci est en partie dû au fait qu'il est invariant par le groupe des transformations orthogonales de l'espace. En dimension 2 d'espace il a un statut particulier : En effet, compte tenu des relations de Cauchy-Riemann, une fonction réelle  $u(x_1, x_2)$  est la partie réelle (ou imaginaire) d'une fonction analytique si et seulement si elle vérifie la relation (qui se conserve par transformation conforme) :

$$\Delta u = 0.$$

Ceci montre qu'en dimension 2 d'espace toute fonction solution de l'équation est analytique. Cette propriété se généralise à toute dimension d'espace pour les opérateurs elliptiques à coefficients analytiques dont le laplacien est le "modèle". On parle d'opérateur elliptique car son symbole est le terme

principal de l'équation d'une sphère ou en généralisant à des coefficients différents d'un ellipsoïde. Dans un domaine  $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ , connexe de frontière  $\partial\Omega$ , le laplacien conduit à des problèmes aux limites dont les plus classiques sont

$$-\Delta u + \lambda u = f \text{ dans } \Omega$$

avec les conditions aux limites de Dirichlet  $u = g$  sur  $\partial\Omega$ , de Neuman  $\partial_n u = h$  sur  $\partial\Omega$  ou de Fourier  $u + \sigma \partial_n u = h$  sur  $\partial\Omega$  - $\partial_n$  désignant la dérivation selon la normale extérieure à  $\partial\Omega$ . En particulier

$$-\Delta V = 4\pi\rho \text{ dans } \Omega, V = V_{ext} \text{ sur } \partial\Omega$$

est l'équation fondamentale de l'électrostatique (avec  $\rho$  désignant la densité de charge à l'intérieur du conducteur et  $V_{ext}$  le potentiel imposé sur sa paroi).

Dans certains problèmes de mécanique des fluides, par exemple l'écoulement de l'air autour d'une aile d'avion volant à vitesse modérée (régime subsonique), on peut considérer que l'écoulement est stationnaire incompressible et irrotationnel. En dimension deux d'espace l'incompressibilité se traduit par la relation :

$$\nabla \cdot u = 0 \Rightarrow \partial_{x_1} u_1 + \partial_{x_2} u_2 = 0.$$

Le fait que l'obstacle (aile par exemple) soit imperméable implique sur  $\partial\Omega$ , bord de l'obstacle, la condition :

$$n_1 u_1 + n_2 u_2 = 0.$$

Compte tenu de ces équations il existe une fonction  $\Phi$  (dite fonction courant) telle que l'on ait dans  $\Omega$  :

$$(u_1, u_2) = \nabla \wedge \Phi = (\partial_{x_2} \Phi, -\partial_{x_1} \Phi)$$

et le fait que le fluide soit irrotationnel entraîne la relation :

$$-\Delta \Phi = 0 \text{ dans } \Omega.$$

Les conditions aux limites se déduisent de (4.44) et du fait qu'à l'infini la vitesse  $u_\infty$  est prescrite comme étant constante; cela donne :

$$\partial_n \Phi = 0, \text{ sur } \partial\Omega, \lim_{|x| \rightarrow \infty} \nabla \Phi = (u_\infty)^\perp.$$

Le laplacien est invariant par transformation conforme, donc un certain nombre de configurations peuvent se ramener à des cas modèles où des calculs explicites sont possible. Avant l'apparition des "gros" calculateurs scientifiques cette démarche (et celles qui en sont dérivées) était l'une des plus utilisée pour les calculs d'aérodynamique.

## 4.2 Le laplacien comme opérateur non borné

Pour un ouvert connexe  $\Omega$  borné ou non de  $\mathbf{R}^n$  on introduit (l'espace souvent noté  $H$ )  $L^2(\Omega)$ . L'opérateur  $-\Delta$  est bien défini au sens des distributions mais il n'opère pas dans  $L^2(\Omega)$ . Pour remédier à cela et pour tenir compte des conditions aux limites on utilise la notion d'opérateur *non borné*

introduite dans la section (3.1.2 ). Par exemple on définit  $-\Delta_d$  et  $-\Delta_n$  par leurs domaines et leurs actions :

$$\begin{aligned} D(-\Delta_d) &= \{u \in L^2(\Omega) \setminus -\Delta u \text{ (au sens des distributions)} \in L^2(\Omega), \\ &u = 0 \text{ sur } \partial\Omega\} \text{ avec } -\Delta_d u = -\Delta u; u \in D(-\Delta_d). \\ D(-\Delta_n) &= \{u \in L^2(\Omega) \setminus -\Delta u \text{ (au sens des distributions)} \in L^2(\Omega), \\ &\partial_n u = 0 \text{ sur } \partial\Omega\} \text{ avec } -\Delta_n u = -\Delta u; u \in D(-\Delta_n). \end{aligned}$$

Les fonctions de  $L^2(\Omega)$  sont définies modulo leur valeur sur un sous ensemble de mesure nulle et justement le bord  $\partial\Omega$  est un ensemble de mesure nulle. Cette difficulté est levée en utilisant le fait que  $-\Delta u$  appartient aussi à  $L^2(\Omega)$ . Ceci suffit pour définir de manière unique  $u$  et  $\partial_n u$  sur  $\partial\Omega$ . Cette démarche préserve les intégrations par partie et en particulier les différentes variantes des formules de Green-Stokes. Ainsi on démontre que les opérateurs  $-\Delta_d$  et  $-\Delta_n$  sont autoadjoints positifs. Comme cela a été évoqué dans l'exemple 2 de la section (3.1.2) leur spectre est formé d'une suite  $0 \leq \lambda_i$  de valeurs propres positives sans point d'accumulation à distance finie et qui tendent vers l'infini tandis que les vecteurs propres correspondants (comme dans la formule (3.20)) forment une base hilbertienne.

L'exemple le plus simple de cette situation s'obtient en dimension 1 d'espace : On choisit pour  $\Omega$  l'ouvert  $]0, L[$  et un calcul explicite montre que l'équation :

$$-\frac{\partial^2 u}{dx^2} - \lambda u = f, u(0) = u(L) = 0$$

admet une unique solution pour

$$\lambda \neq \frac{(k\pi)^2}{L^2}$$

Le spectre (ponctuel) est la réunion des points :  $\frac{(k\pi)^2}{L^2}$ ; les vecteurs propres correspondant étant les fonctions :

$$w_{\lambda_k}(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \sin\left(\frac{k\pi x}{L}\right) \quad k = 0, 1, \dots, \lambda_k = \frac{(k\pi)^2}{L^2}$$

qui vérifient bien sur

$$-\Delta_d w_{\lambda_k}(x) = \lambda_k w_{\lambda_k}(x).$$

On vérifie que cette suite de vecteurs propres forme bien une base hilbertienne de l'espace  $L^2(\Omega)$ .

L'analyse ci dessus se généralise au cas du problème de Dirichlet (de Neumann et d'autres) dans un ouvert  $\Omega$  borné. Pour évaluer le comportement asymptotique des valeurs propres on utilise la fonction de comptage :

$$N(\lambda) = \#\{\lambda_k \leq \lambda\}$$

Le lecteur remarquera les similitudes et différences existant entre cette objet et la fonction

$$N(\hbar) := \#\{E_j \in [E - c\hbar, E + c\hbar]\}$$

introduite dans la section (3.4). Dans les deux cas il s'agit de compter des valeurs propres mais dans la section (3.4) le calcul était fait en fonction d'un paramètre  $\hbar$  supposé tendre vers zéro, tandis

qu'ici l'asymptotique est prise par rapport  $\lambda \rightarrow \infty$ . En fait  $\sqrt{\lambda}$  s'interprète comme une fréquence, et l'analyse à hautes fréquences pour les solutions d'une équation aux dérivées partielles est similaire à l'analyse pour  $\hbar \rightarrow 0$  des solutions d'équations du type Schrödinger. En particulier des formules de trace semblable à (3.31) sont obtenues par des algorithmes identiques. Le recours aux hautes fréquences fait que, ici, seule la partie principale de l'opérateur joue un rôle. Même si on introduisait un potentiel (borné), il n'apparaîtrait pas dans ces calculs. Ainsi les valeurs propres sont des objets purement géométriques.

Ces valeurs propres interviennent de manière fondamentale dans les équations de propagation des ondes et de la chaleur (sur un ouvert  $\Omega$ ).

Elles apparaissent aussi en théorie des nombres : si  $\Omega$  est un carré de côté 1 les fonctions propres et les valeurs propres du laplacien sont

$$w_{\lambda_k}(x) = \sin(n\pi x) \sin(m\pi y), \quad \lambda_k = \pi^2(n^2 + m^2).$$

L'évaluation de  $N(\lambda)$  est bien dans ce cas un problème de théorie des nombres : compter le de points de coordonnées entières dans un disque de rayon  $\sqrt{\lambda}$ . On démontre (cf (4.44) ci dessous) que

$$N(\lambda) = \frac{\sqrt{\lambda}}{4\pi} + o(\sqrt{\lambda}).$$

Par contre l'évaluation du terme en  $o(\sqrt{\lambda})$  est un problème classique de théorie des nombres toujours ouvert.

La formule (4.44) a été généralisée par Hermann Weyl au laplacien avec condition de Dirichlet (ou de Neumann) dans un ouvert borné  $\Omega \subset \mathbf{R}^n$ .

$$N(\lambda) = \frac{|\Omega|}{(4\pi)^{\frac{n}{2}} \Gamma(\frac{n}{2} + 1)} \lambda^{\frac{n}{2}} + o(\lambda^{\frac{n}{2}}).$$

Le calcul du terme dominant se fait en utilisant les propriétés de l'équation de la chaleur, celui du terme suivant est beaucoup plus compliqué.

## 5 La formulation variationnelle

### 5.1 introduction et formalisme

Dans  $\Omega$  ouvert borné de  $\mathbf{R}^n$  on considère la solution du problème de Dirichlet :

$$u - \Delta u = f, f \in L^2(\Omega), u = 0 \text{ sur } \partial\Omega.$$

Cette solution existe et est unique, ne serait ce que parce que  $-\Delta$  avec condition de Dirichlet sur le bord définit un opérateur autoadjoint positif dans  $L^2(\Omega)$ . Maintenant en multipliant l'équation précédente par une fonction  $v$  quelconque mais régulière et nulle sur le bord on obtient :

$$\int_{\Omega} \left( u(x)\overline{v(x)} + \nabla_x u(x)\overline{\nabla_x v(x)} \right) dx = \int_{\Omega} f(x)\overline{v(x)} dx.$$

ce qui peut s'interpréter comme la solution d'un problème de représentation de forme sesquilinéaire par le théorème de Riesz : on introduit l'espace de Sobolev  $H^1(\Omega)$  des fonctions  $L^2(\Omega)$  dont les dérivées partielles premières au sens des distributions appartiennent aussi à  $L^2(\Omega)$  avec le produit scalaire défini par le premier membre, noté  $((\cdot, \cdot))$ . On note  $H_0^1(\Omega) \subset H^1(\Omega)$  le sous espace (fermé) des fonctions nulles sur  $\partial\Omega$ . On démontre que ce sous espace coïncide avec l'adhérence pour la norme  $H^1(\Omega)$  des fonctions régulières à support compact dans  $\Omega$ . Enfin

$$v \mapsto l(v) = \int_{\Omega} f(x) \overline{v(x)} dx$$

définit une application antilinéaire continue sur  $H^1(\Omega)$ . Avec ce formalisme on observe que trouver la solution est équivalent à déterminer l'unique fonction  $u \in H_0^1(\Omega)$  telle que l'on ait

$$\forall v \in H_0^1(\Omega), ((u, v)) = l(v).$$

Ainsi l'existence et l'unicité d'une telle fonction résulte alors trivialement du théorème de représentation de Riesz.

Cela vaut la peine de généraliser encore un peu cette situation dans le cadre suivant. On considère deux espaces de Hilbert  $H$  et  $V$  (dans l'exemple précédent  $H$  était l'espace  $L^2(\Omega)$  et  $V$  l'espace  $H_0^1(\Omega)$ ) muni de deux produits scalaires différents. On suppose que  $V$  est contenu dans  $H$  que l'injection de  $V$  dans  $H$  est une application continue (pour les normes de  $V$  et  $H$ ) et enfin que  $V$  est (pour la topologie de  $H$ ) dense dans  $H$ ; alors l'identification de  $H$  avec son dual (antidual si l'on considère des espaces de fonctions complexes) réalise une injection de cet espace dans  $V^*$ , le dual (antidual) de  $V$ . Ce qui donne le "triplet de Gelfand"

$$V \subset H \subset V^*.$$

Dans ce cadre les forme sesquilinéaire  $(u, v) \mapsto a(u, v)$  continues s'identifient à des opérateurs linéaires continus de  $V$  dans  $V^*$  selon la formule de dualité :

$$\forall (u, v) \in V \times V; A_a(u)(v) = a(u, v)$$

et par restriction de leur image à  $H$  définissent encore (cf Section 3.1.2) des opérateurs non bornés dans  $H$ , dont les domaines et actions sont donnés par :

$$D(A_{aH}) = \{u \in V \text{ tel que } A_a(u) \in H\}, A_{a,H}(u) = A_a(u) \text{ pour } u \in D(A_{aH}). \quad (5.44)$$

## 5.2 Le théorème de Lax Milgram

Dans le formalisme ci dessus le théorème de représentation de Riesz se généralise sous le nom de théorème de Lax Milgram.

**Théorème 5.1** *Soit  $(u, v) \mapsto a(u, v)$  une forme sesquilinéaire continue sur  $V \times V$  alors, s'il existe une constante  $\alpha > 0$  telle que, pour tout  $u \in V$ , on ait  $|a(u, u)| \geq \alpha \|u\|^2$ , alors l'opérateur  $A_a$  réalise un isomorphisme de  $V$  sur  $V^*$ . De plus, si on a la condition (plus forte),*

$$\forall u \in V \operatorname{Re}(a(u, u)) \geq \alpha \|u\|^2,$$

*l'opérateur  $-A_{aH}$  est générateur d'un semi groupe fortement continu dans  $H$ .*



Comme il est facile de prouver que l'adjoint de  $A_{aH}$  est un opérateur positif, la dernière assertion du théorème ci dessus est un exemple d'application du Théorème 3.2 de la section (3.1.2). Le formalisme ci dessus s'est avéré très fructueux. On va donner ci dessous différents types d'applications et il convient de garder à l'esprit que ces différentes extensions peuvent être combinées entre elles. Pour simplifier l'exposé, et aussi parce que c'est dans ce cadre que résident les applications, on se limite à des fonctions à valeur réelles.

### 5.2.1 Conditions aux limites et inégalité de Poincaré

Un des avantages essentiels du formalisme ci dessus, dit *formulation variationnelle*, est de contenir à la fois l'équation aux dérivées partielles et les conditions aux limites. En agissant sur l'espace  $V$  et sur la forme linéaire on peut traiter différentes conditions aux limites. Soit  $\Gamma \subset \partial\Omega$  une partie de mesure non nulle du bord. On introduit l'espace  $V = \{u \in H^1(\Omega) \text{ nulles sur } \Gamma\}$ ; on vérifie qu'il s'agit bien d'un sous espace fermé de  $H^1(\Omega)$ , donc d'un espace de Hilbert. Ici et ci dessous on utilise le fait que la trace d'une fonction  $u$  sur  $\partial\Omega$  (qui n'a pas de sens sous l'unique hypothèse  $u \in L^2(\Omega)$ ) est bien définie (par continuité et densité) pour les fonctions de  $H^1(\Omega)$ . On introduit ensuite la forme linéaire (qui avec  $f \in L^2(\Omega)$  et  $g \in L^2(\partial\Omega)$  est continue sur  $V$ ) :

$$v \mapsto \int_{\Omega} f(x)v(x)dx + \int_{\partial\Omega} g(\sigma)d\sigma.$$

Alors avec  $\lambda > 0$  et le théorème de Lax Milgram (dans ce cas simple le théorème de représentation de Riesz suffirait), on a l'existence et l'unicité d'une fonction  $u \in V$  qui vérifie les relations :

$$\forall v \in V, \int_{\Omega} \lambda u(x)v(x) + \nabla u(x)\nabla v(x)dx = \int_{\Omega} (f(x)v(x)dx + \int_{\partial\Omega} g(\sigma)v(\sigma)d\sigma.$$

En prenant  $v \in \mathcal{D}(\Omega)$  on en déduit que  $u$  vérifie :

$$-\Delta u + \alpha u = f \text{ au sens des distributions dans } \Omega, u = 0 \text{ sur } \Gamma \subset \partial\Omega.$$

Ensuite en supposant sur  $u$  assez de régularité pour que l'on puisse multiplier par une fonction  $v \in V$  et appliquer la formule de Green, on déduit de l'équation précédente la relation :

$$\int_{\Omega} \lambda u(x)v(x) + \nabla u(x)\nabla v(x)dx - \int_{\Omega} (f(x)v(x)dx = \int_{\partial\Omega} \frac{\partial u}{\partial \vec{n}}(\sigma)v(\sigma)d\sigma$$

qui en comparant avec (5.45) donne

$$\frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = g \text{ sur } \partial\Omega \setminus \Gamma.$$

Ainsi l'unique solution de (5.45) est, si elle est régulière, l'unique solution du problème (avec conditions de Neumann-Dirichlet)

$$-\Delta u + \alpha u = f \text{ dans } \Omega, u = 0 \text{ sur } \Gamma \text{ et } \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = g \text{ sur } \partial\Omega \setminus \Gamma.$$

Le terme  $\lambda > 0$  est utilisé pour assurer l'équivalence avec la norme  $H^1(\Omega)$ . En fait on montre que si  $\Omega$  est borné et si  $\Gamma$  est non vide, il existe une constante  $C > 0$  telle que l'on ait

$$\forall v \in V \int_{\Omega} |v(x)|^2 dx \leq C \int_{\Omega} |(\nabla v)(x)|^2 dx$$

inégalité qui porte, ainsi que ses variantes, le nom d'inégalité de Poincaré. Il en résulte que, dans le cas  $\Gamma \neq \emptyset$ , ce qui précède demeure valable avec  $\lambda = 0$ .

### 5.3 Coefficients variables et peu réguliers

Soit  $A(x) = (a_{ij}(x))$  une matrice  $n \times n$  symétrique réelle à coefficients mesurables et bornés définie sur  $\Omega$ . On suppose que son spectre est borné intérieurement par une constante  $\alpha > 0$ . Alors l'expression

$$\int_{\Omega} ((\lambda u(x)v(x) + (A(x)\nabla u(x), \nabla v(x)))) dx$$

définit sur  $H^1(\Omega)$  un produit scalaire équivalent. Ceci permet d'étendre ce qui est fait ci dessus à des équations impliquant, au lieu du laplacien, l'opérateur

$$u \mapsto -\nabla_x \cdot (A(x)\nabla_x u(x)).$$

On peut également varier sensiblement l'opérateur différentiel en introduisant comme espace  $V$  le complété de l'espace des fonctions régulières sur  $\Omega$  avec la norme :

$$\|u\|_P^2 = \int_{\Omega} (|u(x)|^2 + |P(D)u(x)|^2) dx$$

avec  $P(D)$  un opérateur différentiel ou éventuellement pseudodifférentiel. Et bien sûr  $u$  peut être une fonction à valeur vectorielle. Le cas le plus classique est celui du bilaplacien :

$$\Delta^2 u = f \text{ dans } \Omega, \text{ tandis que sur } \partial\Omega \ u = g \text{ et } \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = h.$$

Ces équations correspondent à régimes limites de l'élasticité lorsque le domaine est infiniment petit dans une ou deux directions : plaques et poutres (cf section (12.3))

#### 5.3.1 Traitement de non-linéarité par interprétation

Le théorème de représentation de Riesz (dont le théorème de Lax Milgram cité ci dessus est une généralisation naturelle) est en fait une conséquence du théorème des projections qui s'énonce comme suit :

**Théorème 5.2** *Soit  $K \subset H$  un sous ensemble convexe fermé d'un espace de Hilbert  $H$ . Alors, pour tout  $u \in H$ , il existe un unique élément  $P_K u$  vérifiant les relations :*

$$P_K u \in K \quad \|u - P_K u\| = \inf_{v \in K} \|u - v\|.$$

Ce minimum est caractérisé par

$$P_K u \in K \quad (u - P_K u, v - P_K u) \leq 0 \quad \forall v \in K$$

et l'application  $u \mapsto P_K u$  est une contraction ( $\|P_K u_1 - P_K u_2\| \leq \|u_1 - u_2\|$ ).

Le théorème de Riesz est linéaire car il correspond au cas où  $K$  est une sous espace fermé de codimension 1. Mais en remplaçant  $V$  par un convexe fermé on peut traiter de larges classes de problèmes non linéaires. L'exemple le plus simple est obtenu en prenant pour  $K$  le sous espace des fonctions de  $H^1(\Omega)$  dont la restriction à  $\partial\Omega$  est une fonction positive. On obtient l'existence et l'unicité de la solution du problème dit de Signorini :

$$u - \Delta u = f \text{ dans } \Omega, \quad u \geq 0 \text{ et } \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} \geq 0 \text{ sur } \partial\Omega, \quad (5.45)$$

$$u(x) \frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = 0 \text{ sur } \partial\Omega. \quad (5.46)$$

Il convient de remarquer que c'est dans (5.46) que la non linéarité apparaît de la manière la plus explicite. Si la région  $\Gamma \subset \partial\Omega$  où  $u$  s'annule était connue, le problème ci dessus se réduirait à un problème linéaire avec  $u = 0$  sur  $\Gamma$  et  $\frac{\partial u}{\partial \vec{n}} = 0$  sur  $\partial\Omega \setminus \Gamma$ . Mais c'est justement cette région  $\Gamma$  qui est une des inconnues principale du problème. On parle de problèmes à frontière libre.

Une nouvelle généralisation consiste à remplacer la formulation (5.45) par une du type suivant : déterminer  $u \in V$  sous espace de  $H^1(\Omega)$  qui vérifie la relation :

$$u \in V \subset H^1(\Omega), \quad \int_{\Omega} F(x, u, \nabla u) dx = \inf_{v \in V} \int_{\Omega} F(x, v, \nabla v) dx$$

Avec des hypothèses convenables généralisant la convexité et la coercivité (relation(5.45) ) sur  $V$ , on obtient l'existence d'un unique minimum qui vérifie en particulier :

$$0 = \frac{d}{ds} \int_{\Omega} F(x, u + sv, \nabla(u + sv)) dx |_{s=0} = \int_{\Omega} \frac{\partial F(x, u, \nabla(u))}{\partial u} v + \frac{\partial F(x, u, \nabla(u))}{\partial \nabla u} \nabla v dx$$

ou avec une intégration par parties :

$$\forall v \in V \int_{\Omega} \left[ \frac{\partial F(x, u, \nabla u)}{\partial u} - \nabla \left( \frac{\partial F(x, u, \nabla u)}{\partial \nabla u} \right) \right] v dx = 0.$$

La formulation (5.47) tient ainsi compte de l'équation (en général)

$$-\nabla \left( \frac{\partial F(x, u, \nabla u)}{\partial \nabla u} \right) + \frac{\partial F(x, u, \nabla u)}{\partial u} = 0$$

des conditions aux limites et d'autres contraintes éventuelle. Dans le cadre de la théorie de l'élasticité cette démarche s'interprète par l'introduction de travaux virtuels.

### 5.3.2 Discrétisation

Le point de vue variationnel et en particulier l'aspect minimisation de fonctionnelle d'énergie se prête bien à l'étude de méthodes numériques du type éléments finis. Pour faire un calcul numérique explicite il faut avant tout remplacer un problème distribué (continu) en dimension non finie par un problème *discrétisé* mettant en jeu un nombre fini (peut-être grand) de degrés de liberté. La démarche la plus naturelle consiste pour des équations du type (5.47) à remplacer  $V$  par un sous espace de dimension finie  $V_h \subset V$  dépendant d'un paramètre  $h$  (la dimension  $N$  de  $V_h$  tendant vers l'infini lorsque  $h$  tend vers zéro), à introduire une base  $w_k$  de  $V_h$  et à remplacer des équations (linéaires ou non linéaires) du type (5.47) par un système de  $K$  équations à  $K$  inconnues :

déterminer les coefficients  $c_1, c_2, \dots, c_K$  tels que avec

$$u_h = \sum_{1 \leq k \leq K} c_k w_k$$

on ait

$$\forall 1 \leq k \leq K, \int_{\Omega} \frac{\partial F(x, u_h, \nabla(u_h))}{\partial u} w_k + \frac{\partial F(x, u_h, \nabla(u_h))}{\partial \nabla u} \nabla w_k dx = 0.$$

Une telle démarche porte le nom de *méthode de Galerkin*. En fait une certaine flexibilité peut être introduite et l'on peut choisir des espaces de dimension finie qui "approchent"  $V$  sans être contenus dans  $V$  (on parle alors de méthodes non conformes). On peut aussi choisir les  $K$  fonctions test différentes des  $w_k$  et dans un espace différent (méthode de Petkov-Galerkin). Enfin ce formalisme se prête remarquablement bien à des estimations d'erreurs.

Dans le cadre d'un problème linéaire, par exemple pour l'équation (avec  $A(x)$  une matrice définie positive)

$$-\nabla(A(x)\nabla u) = f \text{ in } \Omega, u = 0,$$

cela se réduit (avec  $w_k \in H_0^1(\Omega)$ ) au système :

$$\forall 1 \leq k \leq K \sum_{1 \leq l \leq K} \left( \int_{\Omega} A(x) \nabla w_l \nabla w_k dx \right) c_l = \int_{\Omega} f(x) w_k(x) dx.$$

La matrice

$$a_{k,l} = \int_{\Omega} A(x) \nabla w_l \nabla w_k dx$$

est dite matrice de masse. Elle "hérite" de la matrice  $A(x)$  le fait d'être symétrique définie positive. On retrouve et on formalise ainsi une méthode d'ingénieurs qui consiste, par exemple en élasticité, à découper une structure en petits éléments, *on parle d'éléments finis*, et à évaluer l'interaction entre ces éléments. Cela revient à construire les  $w_k$  comme fonctions dont la restriction à chaque élément est d'un type donné (en général un polynôme de degré assez petit et dont le support est contenu dans un petit nombre d'éléments.)

Plusieurs propriétés essentielles font que la méthode des éléments finis s'est imposée dans des "grands codes" d'analyse numérique.

La méthode est systématique et flexible et en particulier s'adapte bien à des calculs dans des domaines complexes.

Comme les  $w_k$  sont localisés, la matrice de masse  $a_{k,l}$  est creuse (beaucoup de ses éléments sont nuls), ce qui est précieux pour la résolution du système (5.47) lorsque  $K$  est grand. D'ailleurs cette résolution se fait souvent par des méthodes de balayage inspirée de la méthode itérative de Gauss Seidel (et surtout les méthodes de sous-espaces de Krylov comme GMRES, voir [11]).

Enfin les calculs d'erreur se déduisent des propriétés des fonctions  $w_k$ .

## 6 L'équation de la chaleur

### 6.1 Introduction

L'équation de propagation de la chaleur apparaît dans le mémoire de Fourier. Bien entendu à cette période on ne disposait pas d'explication de la chaleur à partir de la théorie atomique (comme cela peut se faire maintenant à partir de l'équation de Boltzmann). Par contre on avait une bonne notion de la propagation de cet objet en disant que la propagation était proportionnelle à la variation du gradient de la température. Une équation de bilan donne alors dans un domaine  $\Omega$  avec  $\kappa$  la conductibilité calorifique.

$$\partial_t u - \nabla(\kappa \nabla u) = g.$$

De cette observation résulte le fait que l'on a un opérateur du second ordre en  $x$  avec seulement une dérivée en temps et un coefficient  $\kappa > 0$ . Pour un problème posé dans un domaine on introduit ici aussi des conditions aux limites correspondant soit à une température de référence sur le bord  $u = 0$ , soit à un milieu isolé  $\partial_n u = 0$ , soit à une interaction entre le bord et le milieu (loi de Fourier)

$$u + \beta \partial_n u = 0 \text{ sur } \partial\Omega.$$

Fourier construit (à défaut de calcul sur ordinateurs) la représentation de la solution par série ou intégrales de Fourier. Par exemple si le domaine est l'intervalle  $]0, 1[$  avec les conditions aux limites  $u = (0, t) = u(1, t) = 0$  on dispose (cf section 4.2) du spectre (valeurs propres et fonctions propres) du laplacien :

$$-\frac{d^2 \sqrt{2} \sin(k\pi x)}{dx^2} = k^2 \pi^2 \sqrt{2} \sin(k\pi x)$$

et en reportant dans (6.47), avec  $g = 0$ , on obtient la représentation :

$$u(x, t) = 2 \sum_{1 \leq k < \infty} c_k e^{-k^2 \pi^2 t} \sin(k\pi x), c_k = \int_0^1 u(x, 0) \sin(k\pi x) dx.$$

De même pour  $\kappa = 1$ ,  $\Omega = \mathbf{R}^n$  et  $g = 0$  la transformation de Fourier :

$$\hat{u}(k, t) = \int_{\mathbf{R}^n} u(x, t) e^{-ikx} dx$$

transforme l'équation (6.47) (comme c'est le cas pour toute équation différentielle à coefficients constants) en l'équation différentielle ordinaire :

$$\partial_t \hat{u}(k, t) + k^2 \hat{u}(k, t) = 0$$

Ce qui donne :

$$\hat{u}(k, t) = e^{-tk^2} \hat{u}(k, 0)$$

ou en revenant à l'espace physique :

$$u(x, t) = \frac{1}{(4\pi t)^{n/2}} \int e^{-\frac{|x-y|^2}{4t}} u(y, 0) dy.$$

L'inspection des formules explicites indique pour toute donnée initiale de carré intégrable

$$\|u(\cdot, 0)\|^2 = \int_{\Omega} |u(x, 0)|^2 dx < \infty$$

les propriétés suivantes

1- Irréversibilité : Avec une donnée à l'instant  $t = 0$  la solution est bien définie pour tout temps positif. Elle est même très régulière (analytique par rapport aux variables d'espace et de temps).

2- L'application  $u(x, 0) \mapsto u(x, t)$  définit pour  $t > 0$  un opérateur linéaire  $u(x, t) = (U(t)u(\cdot, 0))(x)$  à contraction dans  $L^2(\Omega)$  vérifiant pour  $t \geq 0, s \geq 0$  la relation  $U(t) \circ U(s) = U(t + s)$  Il ne peut pas se prolonger en un groupe d'opérateur (avec  $t < 0$ ) et il s'agit ici de l'exemple fondamental d'un semi groupe (cf. Théorème 3.2).

3- La solution vérifie le principe du maximum :

$$\min_{x \in \Omega} u(x, 0) \leq u(x, t) \leq \max_{x \in \Omega} u(x, 0)$$

4- La vitesse de propagation est infinie. Plus précisément pour tout  $u(x, 0) \geq 0$  à support dans une boule arbitrairement petite on a, pour tout  $t > 0$  et tout  $x \in \Omega$ ,  $u(x, t) > 0$ .

La démonstration (dans des domaines quelconques avec une conductivité thermique  $\kappa(x, t) > 0$  dépendant du temps et de l'espace (on parle alors d'équation parabolique) des propriétés ci dessus est une des applications les plus explicites du théorème 3.2 de la section 3.1.2. Le laplacien noté ici  $\Delta_D$  ( en tenant compte des conditions aux limites, par exemple Dirichlet,  $u = 0$  sur  $\partial\Omega$  ) est alors le générateur d'un semi groupe fortement continu à contraction noté  $e^{t\Delta_D}$  qui en tant qu'opérateur linéaire continu dans  $L^2(\Omega)$  se représente par un *noyau*

$$(e^{t\Delta_D} u_0)(x) = \int_{\Omega} U(t, x, y) u_0(y) dy.$$

Cela généralise la formule (6.47) établie dans l'espace entier. Tandis que dans un ouvert borné avec les valeurs propres et les fonctions propres  $\lambda_k, w_k(x)$  du Laplacien on a, pour la solution de

$$\partial_t u - \Delta_D u = 0, \quad u(x, 0) = u_0(y)$$

l'expression explicite :

$$u(t, x) = \sum_k e^{-t\lambda_k} w_k(x) \int_{\Omega} u(y) w_k(y) dy.$$

Comme pour les équations différentielles linéaires la solution de l'équation "avec second membre"

$$\partial_t u - \Delta u = g, \quad u(x, t) = 0 \text{ sur } \partial\Omega, \quad u(x, 0) = u_0(x)$$

s'écrit selon la formule de Duhamel

$$u = e^{t\Delta_d} u_0 + \int_0^t e^{(t-s)\Delta_d} g(s) ds = \tag{6.47}$$

$$\int_{\Omega} U(t, x, y) u_0(y) dy + \int_0^t \int_{\Omega} U((t-s), x, y) g(y, s) dy ds. \tag{6.48}$$

## 6.2 Application à la formule de Weyl avec le théorème taubérien

En comparant avec la solution dans l'espace entier, en utilisant (6.47) et le principe du maximum on déduit pour  $t \rightarrow 0_+$  le développement asymptotique

$$\int_{\Omega} U(t, x, x) dx = \sum_k e^{-t\lambda_k} = \frac{1}{(4\pi t)^{\frac{d}{2}}} (a_0 + a_1 t^{\frac{1}{2}} + a_2 t^{\frac{3}{2}} + \dots).$$

Les coefficients  $a_i$  ne dépendent que de la géométrie du domaine. Le premier n'est autre que

$$a_0 = \frac{\text{volume}(\Omega)}{\Gamma(\frac{d}{2} + 1)}$$

le second est proportionnel à la surface  $\partial\Omega$  le troisième fait intervenir la courbure de cette surface etc... Avec la formule :

$$\sum_k e^{-t\lambda_k} = \int_0^{\infty} e^{-\lambda t} \frac{dN(\lambda)}{d\lambda} d\lambda,$$

on observe que la fonction

$$t \mapsto \sum_k e^{-t\lambda_k}$$

coïncide avec la transformée de Laplace de la distribution  $\lambda \mapsto \frac{dN(\lambda)}{d\lambda}$  où  $N(\lambda) = \#\{\lambda_k \leq \lambda\}$ , est la fonction (positive) de comptage introduite en (4.44). Si la fonction  $N(\lambda)$  admettait un développement en puissances :

$$N(\lambda) = \lambda^{\frac{d}{2}} (b_0 + b_1 \lambda^{-\frac{1}{2}} + b_2 \lambda^{-\frac{3}{2}} + \dots) \tag{6.49}$$

une simple identification (qui porte le nom de théorème Abélien) permettrait de déduire les coefficients  $b_k$  en fonction des coefficients  $a_k$ . Mais l'hypothèse (6.49) n'est en général pas exacte du à la présence de termes oscillants (pas des puissances de  $\lambda^{-\frac{1}{2}}$ ). Ainsi, en utilisant la positivité de la distribution  $\lambda \mapsto \frac{dN(\lambda)}{d\lambda}$ , on peut par un théorème plus fin (dit théorème Taubérien) déduire le premier terme  $b_0$  et ainsi prouver la formule de Weyl. Par contre la suite éventuelle du développement fait intervenir des objet plus globaux et l'obtention de résultats plus précis mets en jeu l'analyse microlocale et des calculs semblables à ceux de la Section 3.4.

### 6.3 La formule de Feynmann-Kac

Dans ce paragraphe on se propose de montrer comment la formule de Trotter conduit à l'introduction de l'intégrale de Wiener et à la formule de Feynmann Kac. En vue de cette dérivation l'équation de la chaleur est changée en l'équation de la diffusion par l'introduction d'un facteur  $\frac{1}{2}$  et dans  $L^2(\mathbf{R}^n)$  la solution de l'équation

$$\text{for } t > 0, \partial_t u - \frac{1}{2}\Delta u = 0, u(x, 0) = f(x)$$

est donnée par le semi groupe  $\exp(\frac{t}{2}\Delta)$  de noyau

$$\frac{1}{(2\pi t)^{n/2}} e^{-\frac{|x-y|^2}{2t}}.$$

On déduit de la formule :

$$\exp \frac{t}{2}\Delta = \left(\exp\left(\frac{t}{N}\right)\frac{1}{2}\Delta\right)^N$$

la formule

$$\left(\exp \frac{t}{2}\Delta\right)f(0) = \left[\frac{1}{(2\pi\frac{t}{N})^{n/2}}\right]^N \int \int \dots \int e^{-\frac{|x_1|^2 + |x_2 - x_1|^2 + \dots + |x_{N-1} - y|^2}{2\frac{t}{N}}} f(x_N) dx_1 dx_2 \dots dx_N.$$

Ce qui conduit a introduire sur  $\mathbf{R}^{3N}$  la mesure définie par :

$$\int g(x_1, x_2, \dots x_N) d\mu_N = \left[\frac{1}{(2\pi\frac{t}{N})^n}\right]^N \int \int \dots \int e^{-\frac{|x_1|^2 + |x_2 - x_1|^2 + \dots + |x_{N-1} - y|^2}{2\frac{t}{N}}} g(x_1, x_2, \dots x_N) dx dx_1 dx_2 \dots dx_N \quad (6.50)$$

Pour  $(x, x_1, x_2 \dots x_N)$  donnés on considère ensuite l'ensemble  $B_{lin}$  des applications  $t \mapsto b(t)$  continues de  $\mathbf{R}_+$  dans  $\mathbf{R}^*$  linéaires par morceaux sur les segments  $\frac{k}{N}, \frac{k+1}{N}$  qui vérifient :  $b(\frac{k}{N}) = x_k$ . Comme pour  $t \in \frac{k}{N}, \frac{k+1}{N}$ ,

$$b'(t) = \frac{x_{k+1} - x_k}{\frac{t}{N}}$$

la formule (6.50) devient :

$$\int g(b(t_1), b(t_2), \dots b(t_N)) d\mu_N = \left[\frac{1}{(4\pi\frac{t}{N})^n}\right]^N \int \int \dots \int e^{-\frac{1}{4} \int_0^t |b'(s)|^2 ds} g(b(t_1), b(t_2), \dots b(t_N)) dx dx_1 dx_2 \dots dx_N. \quad (6.51)$$

Faire tendre  $N$  vers l'infini ci dessus revient à construire une mesure de probabilité Gaussienne  $\mu_t$  sur l'ensemble  $\mathcal{B}$  des applications continues de  $\mathbf{R}_+$  dans  $\mathbf{R}^N$ . Cette mesure  $dB$  porte le nom de mesure de Wiener et la solution de l'équation de la chaleur se représente par la formule (écrite en dualité)

$$\forall g \in L^2(\mathbf{R}^3) \int f(x, t) g(x) dx = \int_{\mathcal{B}} f(x + b(t), 0) g(x + b(0)) dx dB.$$



Une application importante en est la représentation de la solution du problème

$$\partial_t u - \frac{1}{2}\Delta u + Vu = 0$$

Dans (6.52)  $V(x)$  représente une fonction (dite, par analogie avec la mécanique quantique, potentiel) que pour simplifier on va supposer continue. Bien entendu  $-V$  est le générateur du groupe de transformations dans  $L^2(\mathbf{R}^n)$  défini par

$$(e^{-tV} f)(x) = e^{-tV(x)} f(x)$$

Comme ce groupe ne commute pas avec le semi groupe  $U(t)$  de l'équation de la chaleur la formule

$$\exp t\left(\frac{1}{2}\Delta - V\right)f(x) = \exp t\frac{1}{2}\Delta e^{-tV(x)} f(x)$$

n'est pas exacte. Par contre la formule suivante, qui s'inspire de la formule de Campbell Hausdorff en dimension finie, et qui est dite formule de Trotter reste valable sous des hypothèse très générales (satisfaites en particulier pour des potentiels continus)

$$e^{t(\frac{1}{2}\Delta - V)} f = \lim_{N \rightarrow \infty} (e^{\frac{t}{2N}\Delta} e^{-\frac{t}{N}V})^N f.$$

En appliquant  $N$  fois la formule (6.50) et la formule (4.44) avec des incréments en  $\frac{t}{N}$  on en déduit la relation :

$$\begin{aligned} \int (e^{t(\Delta - V)} f)(x) g(x) dx &= \int \left( \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \frac{1}{(2\pi \frac{t}{N})^n} \right]^N \right. \\ &\left. \iint \dots \int e^{-\frac{|x_1 - x|^2 + |x_2 - x_1|^2 + \dots + |x_{N-1} - y|^2}{2\frac{t}{N}}} e^{-\frac{t}{N} \sum_{1 \leq i \leq N} V(x_i)} f(x_N) dx_1 dx_2 \dots dx_N dx \right). \end{aligned} \quad (6.52)$$

Avec l'introduction de chemins  $b(t)$  linéaire par morceaux sur les intervalles  $[\frac{k}{N}, \frac{k+1}{N}]$  et vérifiant  $b(\frac{k}{N}) = x_k$  on a, comme dans la formule (6.51),

$$\begin{aligned} \int ((e^{t(\Delta - V)} f)(x) g(x) dx &= \int \left( \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \frac{1}{(4\pi \frac{t}{N})^n} \right]^N \right. \\ &\left. \int \int \dots \int e^{-\frac{1}{4} \int_0^t |b'(t)|^2 dt} e^{-\frac{t}{N} \sum_{1 \leq i \leq N} V(b(\frac{k}{N}))} g(x) f(x + b(t)) dx_1 dx_2 \dots dx_N dx \right). \end{aligned} \quad (6.53)$$

Pour tout chemin continu on a

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{t}{N} \sum_{1 \leq i \leq N} V(b(\frac{k}{N})) = \int_0^t V(b(s)) ds,$$

et ainsi une application directe du théorème de Lebesgue donne maintenant :

$$\int ((e^{t(\Delta - \frac{1}{2}V)} f)(x) g(x) dx = \int_{\mathcal{B} \times \mathbf{R}^3} f(x + b(0)) g(b(t)) e^{-\int_0^t V(b(s)) ds} d\mathcal{B} dx.$$

La formule de Feynmann-Kac convient parfaitement à des évolutions de type "chaleur", mais la présence du nombre complexe  $i$  dans l'équation de Schrödinger ne permet pas de l'étendre immédiatement en toute rigueur à la mécanique quantique. Il faut pour cela faire la construction rigoureuse de la Section 3.5.

## 7 L'équation des ondes

### 7.1 Introduction

L'équation des ondes est un modèle simplifié pour la propagation des ondes acoustiques, des ondes sonores, électromagnétiques et élastiques. Elle implique une quantité scalaire réelle (qui dans le cas de l'élasticité et de l'électromagnétisme doit céder la place à des vecteurs ou des tenseurs) et s'écrit sous la forme :

$$\partial_t^2 u - \Delta u = 0.$$

Quand le problème est considéré dans un domaine  $\Omega$  différent de l'espace entier on impose des conditions aux limites. Les plus classiques sont encore resp Dirichlet, Neuman et la condition d'impédance :

$$\text{sur } \partial\Omega : u(x, t) = 0, \text{ resp } \partial_{\bar{n}}u(x, t) = 0, \text{ resp } \partial_{\bar{n}}u + Z(x)\partial_t u = 0, Z(x) \geq 0.$$

Ces conditions aux limites ont des interprétations physiques simples. La condition de Dirichlet correspond aux vibrations d'un objet fixé par sa frontière : une membrane de tambour ou une corde vibrante attachée par ses extrémités. La condition de Neuman est adaptée pour un instrument à vent. Dans un demi espace les conditions aux limites pour les équations de Maxwell sont des combinaisons explicites des conditions de Dirichlet et de Neumann (et cette propriété est aussi vraie dans un sens plus faible "microlocal" pour la frontière d'un domaine quelconque). Enfin la condition d'impédance correspond au cas où la frontière absorbe de l'énergie. Des conditions aux limites de ce type s'introduisent donc très naturellement pour des problèmes de revêtement absorbant en acoustique ou en furtivité radar. Elles sont aussi utilisées, avec des variantes lorsqu'on fait des simulations numériques d'ondes se propageant dans des milieux infinis (par exemple le complémentaire d'un obstacle) et que l'on veut borner le domaine de calcul en tenant compte du fait que l'onde se disperse à l'infini avec une condition de radiation (cf Section 7.6) ci dessous. Pour les équations de l'élasticité la situation est cependant très différente. A l'intérieur du domaine les équations de l'élasticité décomposent en deux types d'équations d'ondes l'une pour les ondes longitudinales et l'autre pour les ondes transverse par contre avec la condition "physique" d'absence de force extérieure sur la frontière la situation au bord est plus complexe. D'une part les ondes longitudinales et transverses interagissent et d'autre part on observe des ondes se propageant essentiellement au bord dites ondes de Rayleigh. Ce sont celles ci que l'on observe à la surface de la terre lors de tremblement de terre (cf. Section 12.2).

### 7.2 Résultats Globaux

L'équation des ondes est le modèles des problèmes hyperboliques. Comme cela a été dit en introduction, on n'entrera pas ici dans une classification systématique des équations aux dérivées partielles, mais disons seulement que cela se traduit de la manière suivante. En accord avec le fait que figure le terme  $\partial_t^2$  il est, comme le problème de Cauchy pour les équations différentielles ordinaires, bien posé si on se donne à la fois  $u(x, 0)$  et  $\partial_t u(x, 0)$ .

On introduit l'énergie de la solution :

$$\mathcal{E}(t) = \frac{1}{2} \int_{\Omega} \{|\partial_t u|^2 + |\nabla_x u|^2\} dx$$

dont le premier terme (penser à l'exemple de la corde vibrante) correspond à une énergie cinétique et le second terme à une énergie potentielle.

En multipliant (7.54) by  $\partial_t u$  et en intégrant par parties sur  $\Omega$  on obtient la relation :

$$\frac{d\mathcal{E}(t)}{dt} - \int_{\partial\Omega} \partial_{\vec{n}} u \partial_t u d\sigma_x = 0$$

ce qui montre que pour les conditions de Dirichlet et de Neuman  $\mathcal{E}(t)$  est un invariant tandis que pour la condition d'absorption cette quantité décroît selon la relation :

$$\frac{d\mathcal{E}(t)}{dt} + \int_{\partial\Omega} Z(x) |\partial_t u|^2 d\sigma_x = 0.$$

Il est alors commode d'introduire l'opérateur  $\mathcal{A}$  agissant sur  $U = (u(x, t), v(x, t)) = (u(x, t), \partial_t u(x, t))$  suivant les formules

$$\mathcal{A}U = \begin{pmatrix} v \\ \Delta_x u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ \Delta_x & 0 \end{pmatrix} U \quad (7.54)$$

avec une définition convenable de son domaine  $D(\mathcal{A})$  prenant en compte les conditions aux limites

$$\partial_t U = \mathcal{A}U.$$

Compte tenu du rôle de l'énergie il est naturel aussi d'introduire la quantité

$$((U_1, U_2)) = \int_{\Omega} \nabla_x u_1 \overline{\nabla_x u_2} dx + \int_{\Omega} \nabla_x v_1 \overline{\nabla_x v_2} dx.$$

Pour un ouvert borné  $((.,.))$  définit un produit scalaire équivalent sur l'espace  $H_0^1(\Omega) \times L^2(\Omega)$ . Le résultat est aussi vrai pour l'espace  $H^1(\Omega) \times L^2(\Omega)$  à condition de se limiter aux fonctions de moyenne nulle. Ces propriétés s'adaptent au cas d'un ouvert non borné ou de l'espace entier à condition de définir  $H_0^1$  comme l'adhérence des fonctions à support compact.

Ainsi, avec les conditions aux limites de Dirichlet et de Neuman  $\mathcal{A}$  est le générateur d'un groupe unitaire dans les espace correspondant ; avec une condition d'impédance c'est le générateur d'un semi groupe. On en déduit l'existence, l'unicité et la stabilité de la solution du problème :

$$\partial_t^2 u - \Delta u = f \text{ dans } \Omega \times \mathbf{R}_t^+, u(x, 0) = u_0(x), \partial_t u(x, 0) = u_1(x) \text{ dans } \Omega$$

avec condition aux limites.

Bien entendu en l'absence de condition absorbante l'énergie est conservée avec une condition absorbante sur une partie du bord cette énergie décroît et on peut montrer simplement (si le domaine est borné) qu'elle tend toujours vers zéro. De plus le calcul de conservation de l'énergie s'adapte parfaitement à la preuve de propagation à vitesse finie de l'énergie (propriété complémentaire de celle des solutions de l'équation de la chaleur qui elles se propagent à vitesse infinie). On considère dans l'espace entier en dimension quelconque le cas du laplacien homogène avec coefficient 1 comme ci dessus. La

démonstration s'adaptant dans des cas plus généraux. On introduit dans l'espace temps le tronc de cône

$$C(R, x_0, t) = \{(x, s) \mid |x - x_0| \leq R + (t - s)\}. \quad (7.55)$$

On multiplie à nouveau l'équation par  $u_t$  et on intègre par partie en faisant usage de la formule de Green. En désignant par  $\tilde{n}_x, \tilde{n}_t$  les composantes de la normale extérieure à la frontière latérale du cône il vient avec  $d\sigma_{x,s}$  :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_{\{|x-x_0| \leq R\}} |(\partial_t u(x, t))^2 + |\nabla_x u(x, t)|^2) dx \\ & + \int_{\{(x,s) \mid |x-x_0| \leq R+(t-s)\}} \left( \frac{1}{2} \tilde{n}_t |\partial_t u|^2 - \tilde{n}_x \cdot \nabla_x u + \frac{1}{2} \tilde{n}_t |\nabla_x u|^2 \right) d\sigma_{x,s} \\ & = \frac{1}{2} \int_{\{|x-x_0| \leq R+t\}} |(\partial_t u(x, 0))^2 + |\nabla_x u(x, 0)|^2) dx. \end{aligned} \quad (7.56)$$

Compte tenu de la construction du tronc de cône on a  $|\tilde{n}_x| = \tilde{n}_t$ . Aussi le second terme du premier membre de (7.56) est positif et il en résulte l'inégalité :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \int_{\{|x-x_0| \leq R\}} |(\partial_t u(x, t))^2 + |\nabla_x u(x, t)|^2) dx \\ & \leq \frac{1}{2} \int_{\{|x-x_0| \leq R+t\}} |(\partial_t u(x, 0))^2 + |\nabla_x u(x, 0)|^2) dx. \end{aligned}$$

qui exprime que si les données initiales (fonction et dérivée temporelle) sont pour  $t = 0$  nulles dans la boule  $|x - x_0| \leq R + t$  alors la solution à l'instant  $t$  est nulle dans la boule  $|x - x_0| \leq R$ . Par linéarité cela signifie que ce qui se passe à l'instant  $t$  au point  $x_0$  ne dépend que de ce qui se passe à l'instant 0 dans la boule de centre  $x_0$  et de rayon  $R + t$  c'est exactement une notion de propagation du signal à une vitesse inférieure ou égale à 1. Ces démonstrations et remarques s'appliquent pour des problèmes posés dans des domaines distincts de l'espace entier à condition de remplacer le tronc de cône par son intersection avec  $\Omega \times [0, T]$

### 7.3 Formules explicites

Il est utile pour l'intuition et pour dégager des propriétés essentielles de donner des constructions explicites de solutions. Pour profiter de la structure de problème d'évolution du second ordre on introduit (cela convient dans tous les cas cités ci dessus) l'opérateur  $v_0 \mapsto M(t)v_0 = u(x, t)$  qui résout le problème :

$$\begin{aligned} & \partial_t^2 u - \Delta u = 0 \text{ dans } \Omega \text{ avec conditions aux limites convenables} \\ & \text{et conditions initiales } u(x, 0) = 0, \quad \partial_t u(x, 0) = v_0(x). \end{aligned} \quad (7.57)$$

Dans ces conditions la solution de (7.57) modifiée par l'introduction d'une donnée initiale  $u_0(x)$  et d'un second membre  $f(x, t)$  s'écrit :

$$u(x, t) = \frac{dM(t)u_0}{dt} + M(t)v_0 + \int_0^t M(s)f(x, t-s)ds.$$

Avec les conditions aux limites de type Dirichlet ou Neumann l'opérateur  $\mathcal{A}$  est antiadjoint et son spectre se déduit de celui du Laplacien (avec même condition aux limites) par la formule

$$\text{spectre}(\mathcal{A}) = \{\pm i\omega_k\}, \omega_k = \sqrt{\lambda_k}.$$

Pour  $M(t)$  on a l'expression :

$$M(t)v = \sum_{1 \leq k \leq \infty} \frac{\sin \omega_k t}{\omega_k} \phi_{\omega_k}(x)(v, \phi_{\omega_k}).$$

Cela permet de souligner que les fréquences propres du Laplacien vont apparaître dans la décomposition de l'onde comme des harmoniques et cela permet de mettre en évidence des résonances entre les fréquences du Laplacien et celles d'un forçage. Avec un second membre en  $\sin(\omega_f t)g(x)$  la solution est pour  $t \rightarrow \infty$  la somme d'un terme oscillant borné et d'un terme résonnant (croissant linéairement avec  $t \rightarrow \infty$ )

$$u_R(x, t) = \frac{t \sin \omega_f t}{2 \omega_f} \phi_f(x)(g, \phi_f).$$

En dimension 1 d'espace, et sur la droite entière le calcul se simplifie car l'opérateur des ondes se factorise exactement en le produit de deux opérateurs de transport :

$$\partial_t^2 - \nabla_x^2 = (\partial_t - \nabla_x)(\partial_t + \nabla_x).$$

Il en résulte que toute solution s'écrit sous la forme de deux ondes l'une se propageant vers la droite et l'autre vers la gauche.

$$u(x, t) = f(x+t) + g(x-t).$$

En identifiant avec les données initiales on trouve :

$$\begin{aligned} M(t)(u_1)(x, t) &= \frac{1}{2} \int_{x-t}^{x+t} u_1(s) ds, \\ u(x, t) &= M(t)u_1 + \frac{dM(t)}{dt}u_0, \\ u(x, t) &= \frac{1}{2} \int_{x-t}^{x+t} u_1(s) ds + \frac{u_0(x-t) + u_0(x+t)}{2}. \end{aligned} \quad (7.58)$$

On généralise cette construction à  $\mathbf{R}^n$  en introduisant des *ondes planes* se propageant dans la direction  $\omega \in \mathbf{S}^{n-1}$

$$u_\omega(x, t) = h(x \cdot \omega - t) \text{ avec } h \text{ fonction d'une variable.}$$

Bien entendu les solutions construites par (7.59) ne sont pas d'énergie finie, d'où l'idée de décomposer toute solution en intégrale d'ondes planes selon la formule

$$u(x, t) = \int_{\omega \in \mathbf{S}^{n-1}} h(x \cdot \omega - t, \omega) d\omega.$$

Ce calcul motive l'introduction de la transformation de Radon et donne en particulier en dimension  $d = 3$  l'expression :

$$(M(t)u_1) = \frac{t}{4\pi} \int_{\mathbf{S}^2} u_1(x + t\omega) d\omega.$$

Sur l'équation (7.59) on observe une propriété complémentaire à la vitesse finie que l'on pourra appeler forme forte du principe d'Huyghens. Plus précisément si les données initiales sont contenues dans la boule de centre 0 et de rayon  $R$  la solution, à cause de la vitesse finie de propagation, est nulle en dehors du cône  $\{(x, t) \mid |x| \leq R + t\}$ . Mais de plus (utiliser (7.59)) elle est aussi nulle pour  $|x| \leq R - t$  ce qui signifie que tout le signal se propage vers l'extérieur avec une vitesse de module égal à 1.

#### 7.4 Analyse à haute fréquence

On sait depuis toujours (Huyghens) que les ondes se propagent comme des rayons mais, bien sûr à condition de considérer des phénomènes à hautes fréquences. La mise en forme de cette idée a occupé plusieurs générations de mathématiciens. Pour des raisons évidentes liées à la physique elle est antérieure à l'analyse faite pour l'équation de Schrödinger lorsque  $\hbar \rightarrow 0$  mais elle lui est très semblable et les outils pour ces deux problèmes ont été développés en parallèle. Ici une des approches les plus utilisées consiste à introduire le front d'onde d'une fonction  $u$ . On dit qu'un point  $(X_0, \Xi_0)$  n'appartient pas au front d'onde de cette fonction si après localisation (d'abord en espace puis en Fourier au voisinage d'un angle) on obtient une fonction à décroissance rapide :

$$|\theta(\xi) \widehat{\phi u}| \leq C_N |\xi|^{-N}, \quad \forall N > 0.$$

On observe que le front d'onde s'identifie à un fermé de l'espace cotangent en sphère  $S^3(\mathbf{R}^n)$ . On considère (compte tenu de l'utilisation de changement de variable et de la considération de milieux non homogènes) les solutions de l'équation des ondes :

$$\partial_t^2 u - \nabla_x \cdot (A(x) \nabla_x u) = 0.$$

On associe à cette équation le flot Hamiltonien

$$H(x, t, \tau, \xi) = \frac{1}{2} ((A(x)\xi, \xi) - |\tau|^2)$$

qui opère dans le cône d'ondes  $C = \{x, \xi, t, \tau, (A(x)\xi, \xi) - |\tau|^2 = 0\}$ . Le théorème de propagation des singularités (Hörmander) peut alors s'énoncer en disant que pour toute solution  $u$  de l'équation des ondes et toute bicaractéristique  $\gamma$  (solution du système hamiltonien) on a

$$\text{soit } \gamma \subset \text{ front d'ondes de } u \text{ soit } \gamma \cap \{ \text{ front d'ondes de } u \} = \emptyset.$$

Ceci signifie bien que le front d'onde se propage selon les lois de l'optique géométrique.

**Remarque 7.1** Une décomposition en mode propres conduit aux équations :

$$-\Delta\omega_k = \lambda_k\omega_k \quad (7.59)$$

et donc une analyse à hautes fréquences ( $\lambda_k \rightarrow \infty$ ) de (7.59) est équivalente l'analyse analyse semi-classique de

$$-\hbar^2\Delta\omega_k = \tilde{\lambda}_k\omega_k$$

avec  $\hbar \rightarrow 0$  et  $\lambda_k \sim 1$ . On retrouve ainsi les mêmes objets que dans la Section 3.2.2 en particulier en ce qui concerne le passage des caustiques et les déphasages associés.

**Remarque 7.2** Le rôle des conditions aux limites est sensiblement plus important pour les problèmes d'ondes que pour les problèmes de type Schrödinger. Donc cela vaut la peine d'adapter ce qui précède au cas d'un domaine avec frontière et condition aux limites ou à l'interface entre deux domaines d'indice différents. Dans les deux cas on prolonge le flot hamiltonien en s'inspirant des lois de réflexion ou de transmission de Descartes. Cela se fait de manière simple pour des trajectoires non tangentes à la frontière. On parle alors de flot Hamiltonien brisé et ensuite on démontre que génériquement les seules trajectoires qui comptent sont celles qui sont limites uniformes de flots hamiltoniens brisés.

## 7.5 Application de l'analyse haute fréquence

1 A toute trajectoire du flot hamiltonien brisé on peut associer (cf état cohérent etc...) une famille de solutions  $u_k$  d'énergie égale à 1 mais dont l'énergie est inférieure à  $\frac{C}{k^N}$  en dehors de tout voisinage de  $\gamma$

2 Comme dans la Section 3.2.2 on montre que les bicaractéristiques fermées interviennent dans la formule des traces et modifient le terme de Weyl.

3 Dans le problème de stabilisation avec condition au limite de type absorbante

$$\partial_{\vec{n}}u + Z(x)\partial_t u = 0, Z(x) > 0 \text{ sur une partie } \Gamma \subset \partial\Omega \text{ de la frontière}$$

on sait que l'énergie  $\mathcal{E}(t)$  de toute solution tend vers zéro pour  $t \rightarrow \infty$ . Mais en utilisant le théorème de propagation on démontre que cette décroissance sera uniforme et exponentielle

$$\mathcal{E}(t) \leq Ce^{-\beta t}\mathcal{E}(0)$$

si et seulement si il existe un temps  $T$  avec la propriété de stabilisation géométrique suivante. Toute bicaractéristique  $\gamma$  rencontre au moins une fois non tangentiellement  $\Gamma$  pour  $0 < t < T$ . Plus précisément : Pour toute bicaractéristique  $(x(s), t(s), \xi(s), \tau(s))$  il existe  $s^* \in [0, T]$  avec  $x(s^*) \in \Gamma$  et  $\frac{dx(s^*)}{ds} \cdot \vec{n} \neq 0$ .

4 Les conditions aux limites de l'équation de l'élasticité sont sensiblement plus complexes. Elles permettent l'existence dans le demi espace de solutions se propageant horizontalement (avec une vitesse  $c_0$  inférieure à celle des ondes traverses et longitudinales) et localisées près de la frontière :

$$(x_1, x_2) \in \mathbf{R}^2, x_2 \leq 0 \quad U_k(x_1, x_2, t) = U_k(x_2)e^{ik(x_1 - c_0 t)}, |U_k(x_2)| \leq Ce^{\beta x_2}$$

Ce résultat reste valable si la frontière du domaine n'est plus plate mais courbe et la construction se fait à partir d'une solution dont le front d'onde est sur cette surface. Ceci sera abordé dans la Section 12.

## 7.6 Propriétés spécifiques du problème extérieur et équation d'Helmholtz

La situation est plus complexe dans le cas (systématiquement utilisé dans la technologie des radars et des antennes) où  $\Omega$  n'est pas borné mais est plutôt le complémentaire d'un obstacle  $K \subset \mathbf{R}^3$ . L'énergie totale est conservée mais par un effet de dispersion, semblable à l'effet de la condition aux limites absorbante dans un domaine fini on a, pour toute donnée initiale d'énergie finie :

### Théorème 7.1

$$\lim_{t \rightarrow \infty} E_M(u) = \lim_{t \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{2} \int_{\Omega \cap \{|x| \leq M\}} \{|\partial_t u|^2 + |\nabla_x u|^2\} dx \right) = 0. \quad (7.60)$$

Ce théorème montre que localement l'effet de la donnée initiale disparaît (il est dispersé à l'infini) et en accord avec cet énoncé on prouve

**Théorème 7.2** *Toute solution avec des données initiales d'énergie finie et un forçage à support compact en  $x$  et oscillant à la fréquence  $\omega$*

$$\partial_t^2 u - \Delta u = e^{i\omega t} f(x), \quad u(x, t) = 0, \quad \forall x \in \partial\Omega$$

*se comporte asymptotiquement comme une solution oscillante sortante. Pour tout  $\rho > 0$  on a*

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{2} \int_{\omega \cap \{|x| \leq \rho\}} \{|\partial_t u - i\omega e^{i\omega t} w(x)|^2 + |\nabla_x (u - e^{i\omega t} w(x))|^2\} dx = 0 \quad (7.61)$$

*Avec dans (7.61)  $w$  étant l'unique solution "sortante" de l'équation de Helmholtz (c'est à dire par exemple en dimension 3 d'espace)*

$$\omega^2 w + \Delta w = f, \quad w(x) = 0 \text{ sur } \partial\Omega; \text{ et pour } |x| \rightarrow \infty, w(x) = S\left(\frac{x}{|x|}, \omega\right) \frac{e^{-i\omega|x|}}{|x|} + O\left(\frac{1}{|x|^2}\right).$$

L'analyse ci dessus s'étend au problème non homogène :

$$\partial_t^2 u - \Delta u = 0, \quad u(x, t) = e^{i(t|k| - k \cdot x)}, \quad \forall x \in \partial\Omega$$

et conduit comme ci dessus à des régimes permanents de la forme  $u(x, t) \simeq e^{i|k|t} w_k(x)$  avec  $w_k$  solution "sortante" de l'équation de Helmholtz

$$|k|^2 w_k + \Delta w_k = 0 \text{ dans } \Omega \quad (7.62)$$

$$w_k(x) = 0, \text{ sur } \partial\Omega, \quad (7.63)$$

$$w_k(x) = e^{-ik \cdot x} + S\left(\frac{x}{|x|}, \frac{k}{|k|}\right) \frac{e^{-i\omega|x|}}{|x||k|} + O\left(\frac{1}{|x|^2}\right), \text{ pour } |x| \rightarrow \infty. \quad (7.64)$$

Le terme  $S\left(\frac{x}{|x|}, \frac{k}{|k|}\right)$  est appelé diagramme de rayonnement et caractérise la réponse (en régime permanent) de l'obstacle à une excitation par une onde plane oscillante  $e^{i(t|k| - k \cdot x)}$ .

Comme dans le cas de la stabilisation, on montre que la vitesse de convergence dans les formules (7.60) et (7.61) dépend de la géométrie. Cette vitesse est exponentielle et uniforme dans le cas d'un obstacle non-captif (c'est-à-dire qu'il existe un temps  $T$  tel que, pour tout  $t > T$ , tout rayon soit hors d'un voisinage de l'obstacle). Dans le cas captif elle peut être arbitrairement lente.



## 8 Les équations de l'hydrodynamique

### 8.1 Introduction

Les équations de la mécanique des fluides occupent une place privilégiée dans la théorie des équations aux dérivées partielles pour les raisons suivantes :

1 La facilité à observer l'évolution des fluides. Cette observation se retrouve chez de nombreux auteurs et, en particulier, les commentaires de Léonard de Vinci sur la turbulence sont un classique de la discipline.

*doue la turbulente dellacqua sigenera*

*doue la turbolenza dellacqua simantiene plugho*

*doue la turbolenza dellacqua si posa.*

La construction de navires ou d'ouvrages hydrauliques a stimulé une approche analytique du sujet. L'appel de Frédéric II à Euler (inventeur des équations fondamentales de la mécanique des fluides) pour résoudre les problèmes techniques posés par les fontaines du château "Sans souci " en est un exemple.

2 L'introduction, à la fin du 19ième siècle, et au début du 20ième siècle par Maxwell et Boltzmann des équations cinétiques puis l'étude de leur relations avec les équations macroscopiques de la mécanique des fluides (cf Section 9).

3 Enfin l'aspect universel des équations de la mécanique des fluides qui, par leur nature non linéaire et les propriétés qui en découlent (apparition de singularités, instabilités, bifurcation d'états stationnaires et instabilités) sont des modèles pour l'étude d'autres équations aux dérivées partielles. Cette dernière observation explique l'accent mis par la communauté mathématique sur la résolution des équations de Navier Stokes, objet d'un prix Clay.

Différentes équations apparaissent selon le degré de détail avec lesquels on examine les phénomènes. En allant de l'échelle moléculaire jusqu'à descriptions statistiques de régimes macroscopique on trouve la hiérarchie suivante :

Systemes Hamiltoniens

⇓

Equation de Boltzmann

⇓

Equations des fluides macroscopiques (Euler ou Navier-Stokes) et instabilités d'interfaces.

⇓

Modèles de Turbulence.

Dans cette hiérarchie les équations d'Euler jouent un rôle central. Pour décrire l'approche mathématique, c'est par celles-ci qu'il convient de commencer.

## 8.2 L'équation d'Euler compressible et l'équation de Burger

La description hydrodynamique d'un fluide macroscopique fait intervenir les quantités suivantes :

$$\text{densité } \rho(x, t) = \text{densité (de masse) au point } x \text{ et à l'instant } t, \quad (8.65)$$

$$\text{densité de vitesse } u(x, t) = \text{vitesse du fluide au point } x \text{ et à l'instant } t, \quad (8.66)$$

$$\text{densité de température } \theta(x, t) = \text{température du fluide au point } x \text{ et à l'instant } t, \quad (8.67)$$

$$\text{densité d'énergie } E(x, t) = \frac{1}{2}\rho|u|^2 + \frac{3}{2}\rho\theta. \quad (8.68)$$

Les équations d'Euler peuvent être établies en faisant au niveau d'un élément de volume les bilans de conservation de masse, vitesse et énergie. C'est à dire que l'on compense la dérivée par rapport au temps par la variation en espace des flux correspondants. Dans le cas des gaz parfaits ces équations s'écrivent :

$$\partial_t \rho + \nabla_x \cdot (\rho u) = 0, \quad (8.69)$$

$$\partial_t (\rho u) + \nabla_x \cdot (\rho u \otimes u) + \nabla_x (\rho \theta) = 0, \quad (8.70)$$

$$\partial_t \left( \rho \left( \frac{1}{2}|u|^2 + \frac{3}{2}\theta \right) \right) + \nabla_x \cdot \left( \rho u \left( \frac{1}{2}|u|^2 + \frac{5}{2}\theta \right) \right) = 0. \quad (8.71)$$

où  $u \otimes u$  est la matrice :

$$(u \otimes u)_{ij} := u_i u_j$$

et

$$(\rho u \otimes u)_{ij} := \rho u_i u_j$$

On ajoute ensuite la décroissance de l'entropie, donnée par l'inégalité

$$\partial_t \left( \rho \log \left( \frac{\rho^{2/3}}{\theta} \right) \right) + \nabla_x \cdot \left( \rho u \log \left( \frac{\rho^{2/3}}{\theta} \right) \right) \leq 0$$

qui est l'avatar mathématique du principe de Clausius.

Un modèle super-simplifié des équations ci-dessus est l'équation de Burger

$$\partial_t u + \nabla_x \left( \frac{1}{2} u^2 \right) = 0$$

déjà introduite dans la Section 2. Sa solution  $u(x, t)$  pourrait décrire la distribution des vitesses d'un fluide monodimensionnel en l'absence de toute force extérieure. Même avec des données initiales régulières nous avons vu à la fin de la Section 2 que la solution pouvait exhiber au bout d'un temps fini des singularités. La présence de ces discontinuités n'empêche cependant pas de considérer l'équation (8.72) au sens des distributions. Une étude un peu précise va nous permettre d'introduire dans ce cas plusieurs notions méthodologiquement significantes dans des cas plus généraux :

- relation de Rankin-Hugoniot le long d’une courbe de “choc” pour des solutions au sens des distributions
- utilisation d’une entropie pour sélectionner la solution stable
- construction par viscosité évanescence de la solution qui satisfait la condition d’entropie
- stabilité et unicité pour le problème de Cauchy “entropique”.

On montre que, pour des solutions régulières par morceaux, et discontinues (pour simplifier) en un seul point  $x(t)$ , l’équation de Burger est équivalente au système suivant :

$$\partial_t u + u \nabla_x u = 0, \quad (8.72)$$

$$n_t[u_+ - u_-] + \frac{1}{2}n_x[u_+^2 - u_-^2] = 0 \text{ équivalente à } \dot{x}(t) = \frac{u_+ + u_-}{2}. \quad (8.73)$$

L’équation (8.72) est satisfaite au sens usuel là où  $u$  est régulière alors que (8.73) est valable le long de toute *courbe de choc*  $t \mapsto x(t)$  avec  $n(t) = (n_x, n_t)$  désignant la normale à cette courbe et  $u_{\pm}$  les limites à gauche et à droite de la solution. Sur des exemples élémentaires on observe que l’équation (8.72), ou les équations équivalentes (8.72) et (8.73), ne suffisent pas à assurer l’unicité ou la stabilité des solutions en fonction de la donnée initiale. Stabilité et unicité sont assurées par l’adjonction d’une condition d’entropie. On remarque que si  $u$  est une fonction régulière la multiplication de l’équation (8.72) par la fonction  $\eta'(u), \eta \in C^1(\mathbf{R})$  conduit à la relation

$$\partial_t \eta(u) + \nabla_x q(u) = 0, \text{ avec } q(s) = \int \eta'(s) s ds.$$

Mais si  $u$  présente des discontinuités ce calcul cesse d’être exact et ainsi le fait que l’on ait pour une fonction strictement convexe la relation

$$\partial_t \eta(u) + \nabla_x q(u) \leq 0, \text{ avec } q(s) = \int \eta'(s) s ds$$

représente une information supplémentaire. On dit que  $\eta$  est une entropie et  $q$  son flux d’entropie.

On observe enfin (Burger Hopf) que l’équation :

$$\partial_t u_\nu + \nabla_x \left( \frac{1}{2} u_\nu^2 \right) = \nu \nabla_x^2 u_\nu \text{ avec } \nu > 0, u(x, 0) = u_0(x) \in L^\infty(\mathbf{R}) \cap BV(\mathbf{R})$$

(avec  $BV(\mathbf{R})$  désignant l’espace des fonctions à variation bornée) a pour tout  $t > 0$  une solution régulière (on peut pour cela utiliser à la fois le principe du maximum et les propriétés régularisantes de l’équation de la chaleur). En multipliant maintenant (8.74) par  $\eta'(u)$  avec  $s \mapsto \eta(s)$  convexe on obtient la relation

$$\partial_t \eta(u_\nu) + \nabla_x q(u_\nu) = \nu \nabla_x^2 \eta(u_\nu) - \nu (\eta''(u_\nu)) (\nabla_x u_\nu)^2 \leq \nu \nabla_x^2 \eta(u_\nu).$$

En faisant tendre  $\nu$  vers zéro dans les équations (8.74) et (8.74) on déduit que modulo l’extraction d’une sous suite  $u_\nu$  converge vers une solution des équations et inéquations :

$$\partial_t u + \nabla_x \left( \frac{1}{2} u^2 \right) = 0, u(x, 0) = u_0(x), \quad (8.74)$$

$$\partial_t \eta(u) + \nabla_x q(u) \leq 0 \text{ pour toute fonction convexe } s \mapsto \eta(s). \quad (8.75)$$

En approchant la fonction  $s \mapsto |s|$  par des fonctions convexes régulières Krushkov démontre que la solution du problème ci dessus est stable (et donc unique) : plus précisément deux solutions différentes  $u$  et  $v$  correspondant aux données initiales  $u_0(x)$  et  $v_0(x)$  vérifient la relation :

$$\forall t > 0, \int |u(x, t) - v(x, t)| dx \leq \int |u_0(x) - v_0(x)| dx .$$

**Remarque 8.1** 1 Une des difficultés fondamentales pour la construction de solutions d'équations non linéaires à partir "d'estimations a priori naturelles et physiques", réside dans le fait que la convergence faible d'une suite de fonctions ( $u_\nu$  par exemple) n'implique pas la relation :

$$\lim f(u_\nu) = f(\lim u_\nu)$$

dès que  $f$  est non linéaire. L'exemple le plus frappant dû à des oscillations est la suite  $\sin nx$  qui est bornée dans  $L^\infty$  et qui au sens des distributions converge vers 0 tandis qu'avec  $f(s) = s^2$  la fonction

$$f(\sin nx) = (\sin nx)^2 = \frac{1 - \cos 2nx}{2}$$

converge vers  $\frac{1}{2}$ . Une des manières les plus standards de lever cette difficulté consiste établir des estimations de régularité uniformes. Ici l'espace  $L^\infty(\mathbf{R}) \cap BV(\mathbf{R})$  est bien adapté car son injection dans  $L^2_{loc}$  est compacte et de plus les mesures, donc a fortiori les dérivées de fonctions discontinues par morceaux, appartiennent à cet espace.

2 Dans un domaine où la solution est régulière, elle est constante le long des courbes

$$\dot{x}(s) = u(x(s), s)$$

qui, dans le cas présent, sont des droites, et la condition d'entropie implique que la courbe de choc satisfait la relation :

$$u_-(x(t), t) > \dot{x}(t) = \frac{u_-(x(t), t) + u_+(x(t), t)}{2} > u_+(x(t), t)$$

qui signifie que les caractéristiques rentrent dans le choc. Dans les exemples "non physiques" elles sortent du choc et c'est ce qui introduit instabilité et indétermination.

Les propriétés des solutions entropiques de l'équation d'Euler compressible sont analogues à celles de l'équation de Burger, mais les démonstrations sont considérablement plus compliquées. Ceci est intuitivement dû au fait que, en dimension supérieure d'espace, les surfaces où la solution est singulière (support d'onde de choc) peuvent être arbitrairement complexes.

En dimension 2 ou 3 d'espace, on sait démontrer que des données initiales régulières de type "compression" (c'est à dire avec  $\int_{\mathbf{R}^3} \rho_0(x) u_0(x) \cdot x \frac{dx}{|x|}$  suffisamment négatif) génèrent des singularités au bout d'un temps fini. On sait également et depuis longtemps démontrer que si les données initiales sont assez régulières (par exemple dans l'espace de Sobolev  $H^{\frac{5}{2}} = H^{\frac{d+2}{2}}$ ) on a, pendant un temps fini de l'ordre de l'inverse de la norme de la donnée initiale, une solution régulière. On ne sait toujours pas

démontrer pour tout temps l'existence et l'unicité d'une solution faible (voir Section 2.3) des équations d'Euler avec la condition d'entropie :

$$\partial_t \left( \rho \log \left( \frac{\rho^{2/3}}{\theta} \right) \right) + \nabla_x \cdot \left( \rho u \log \left( \frac{\rho^{2/3}}{\theta} \right) \right) \leq 0.$$

C'est pourtant ce qui correspondrait à l'intuition physique.

En dimension 1 d'espace la situation est sensiblement meilleure : on peut, par une "diagonalisation du système" utilisant les invariants de Riemann, se ramener à une structure simplifiée et, dans ce cas, obtenir des résultats globaux d'existence de solutions entropiques. En fait ces résultats ont été obtenus par Glimm et n'ont pas été, depuis, fondamentalement améliorés.

### 8.3 Les équations Navier Stokes et les équations d'Euler incompressibles

Les équations de Navier-Stokes compressibles :

$$\partial_t \rho^\epsilon + \nabla_x \cdot (\rho^\epsilon u^\epsilon) = 0, \quad (8.76)$$

$$\rho^\epsilon (\partial_t + u^\epsilon \cdot \nabla_x) u^\epsilon + \nabla_x p^\epsilon = \epsilon \nabla_x \cdot (\nu^\epsilon \sigma^\epsilon), \quad (8.77)$$

$$\frac{n+2}{2} \rho^\epsilon (\partial_t + u^\epsilon \cdot \nabla_x) \theta^\epsilon - (\partial_t + u^\epsilon \cdot \nabla_x) p^\epsilon = \epsilon \frac{1}{2} \nu^\epsilon |\sigma^\epsilon|^2 + \epsilon \nabla_x \cdot (\kappa^\epsilon \nabla_x \theta^\epsilon). \quad (8.78)$$

s'obtiennent en ajoutant aux équations d'Euler des termes prenant en compte la viscosité et la diffusivité thermique, déterminées par des fonctions données  $\nu$  et  $\kappa$  au moyen des quantités  $\nu^\epsilon := \nu(\rho^\epsilon, \theta^\epsilon)$  et  $\kappa^\epsilon := \kappa(\rho^\epsilon, \theta^\epsilon)$ , ainsi que le tenseur des contraintes  $\sigma^\epsilon$  donné par l'équation :

$$\sigma^\epsilon \equiv \nabla_x u^\epsilon + (\nabla_x u^\epsilon)^T - \frac{2}{n} \nabla_x \cdot u^\epsilon I,$$

Ces équations ont d'abord été établies phénoménologiquement tandis qu'au début du 20ième siècle Chapman et Enskog en ont donné une dérivation à partir de l'équation de Boltzmann (cf. Section 9). Dans cette dérivation  $\epsilon$  proportionnel au libre parcours moyen est l'inverse du nombre de Knudsen. Pour une étude qualitative ou numérique on introduit les temps  $T$ , longueur  $L$  et vitesse  $U$  caractéristiques. Dans des variables sans dimension :

$$t' = \frac{t}{T}, \quad x' = \frac{x}{L} \text{ et } u = U u'$$

on réécrit (en omettant les ' ) les deux premières équations de ce système sous la forme :

$$\frac{L}{TU} \partial_t \rho^\epsilon + \nabla_x \cdot (\rho^\epsilon u^\epsilon) = 0, \quad (8.79)$$

$$\rho^\epsilon \left( \frac{L}{TU} \partial_t + u^\epsilon \cdot \nabla_x \right) u^\epsilon + \nabla_x \left( \frac{L}{U^2} p^\epsilon \right) = \nabla_x \cdot \left[ \frac{\epsilon \nu}{UL} \nu \sigma(u_\epsilon) \right], \quad p^\epsilon = \rho^\epsilon \theta^\epsilon. \quad (8.80)$$

Les nombres  $\frac{L}{TU}$  et  $Re = \left( \frac{\epsilon \nu}{UL} \right)^{-1}$  sont dits nombres de Strouhal et de Reynolds. Si on suppose que la vitesse  $u^\epsilon$  est d'ordre  $\epsilon$  et que les fluctuations de la densité et de la température sont également d'ordre  $\epsilon$  (par rapport à une densité et une température constante, égale à 1 pour fixer les idées)

$$\rho_\epsilon = 1 + \epsilon \tilde{\rho}, \quad \theta_\epsilon = 1 + \epsilon \tilde{\theta},$$

un passage formel à la limite ( $\epsilon \rightarrow 0$ ) dans (8.76, 8.77, 8.78) donne le système de Navier-Stokes incompressible :

$$\nabla_x \cdot u = 0, \quad \frac{L}{TU} \partial_t u + u \cdot \nabla_x u + \nabla_x p = \frac{1}{Re} \Delta u$$

et pour la propagation de la chaleur l'équation :

$$\frac{L}{TU} \partial_t \theta + u \cdot \nabla_x \theta = \kappa \Delta \theta.$$

Dans la suite de ce paragraphe on se ramènera par un changement de variable en temps à un nombre de Strouhal égal à 1. Avec la relation  $\nabla_x \cdot u = 0$  on réécrit les équations de Navier-Stokes sous une forme adaptée à la définition de solutions faibles :

$$\partial_t u + \nabla_x (u \otimes u) + \nabla_x p - \frac{1}{Re} \Delta u = 0 \quad \nabla_x \cdot u = 0. \quad (8.81)$$

et on notera à nouveau  $\nu$  la viscosité sans dimension i.e. l'inverse du nombre de Reynolds. La pression apparaît de manière implicite comme le multiplicateur de Lagrange de la contrainte  $\nabla_x \cdot u = 0$  et on peut l'éliminer, par exemple dans l'espace entier, en résolvant l'équation :

$$-\Delta_x p = \sum_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i}.$$

Enfin cela vaut aussi la peine d'écrire l'équation (8.81) en termes de  $\omega$ , rotationnel du champ de vitesse  $u$ , et qui représente dans le cas de la mécanique des fluides le tourbillon. Son énergie :

$$\int_{\Omega} |(\nabla_x \wedge u)(x)|^2 dx$$

est appelée enstrophie.

On obtient ainsi

$$\partial_t \omega + u \cdot \nabla_x \omega - \omega \cdot \nabla_x u - \nu \Delta \omega = 0, \quad (8.82)$$

$$\nabla_x \cdot u = 0, \quad (8.83)$$

$$\nabla_x \wedge u = \omega. \quad (8.84)$$

Ce système, en dimension 2 d'espace, s'interprète comme un écoulement planaire. Le tourbillon est donc perpendiculaire au plan de l'écoulement et les équations (8.82) se simplifient pour devenir

$$\partial_t \omega + u \cdot \nabla_x \omega - \nu \Delta \omega = 0, \quad (8.85)$$

$$\nabla_x \cdot u = 0, \quad \nabla_x \wedge u = \omega. \quad (8.86)$$

Tandis que pour l'équation d'Euler ( $\nu = 0$ ) on a :

$$\partial_t \omega + u \cdot \nabla_x \omega = 0 \quad \nabla_x \cdot u = 0, \quad (8.87)$$

ce qui consiste à dire que le tourbillon est transporté par l'écoulement. Pour des problèmes définis dans des domaines  $\Omega$  différents de l'espace entier, donc avec une frontière  $\partial\Omega$ , il convient d'imposer des conditions aux limites sur cette frontière. Les plus classiques consistent à donner  $u$  (éventuellement égal à 0) sur  $\partial\Omega$  pour Navier-Stokes, et  $u \cdot \vec{n} = 0$  avec  $\vec{n}$  désignant la normale à  $\partial\Omega$  pour l'équation d'Euler.

Enfin pour toute solution  $u$  régulière, nulle sur le bord de  $\Omega$ , la multiplication de l'équation par  $u$  et une intégration par partie conduisent à l'égalité d'énergie :

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega} |u(x, t)|^2 dx + \nu \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla_x u(x, s)|^2 dx ds = \frac{1}{2} \int_{\Omega} |u(x, 0)|^2 dx. \quad (8.88)$$

Les théorèmes d'existence d'unicité et de stabilité sont en adéquation avec ces estimations.

#### 8.4 Existence, unicité et stabilité de la solution de l'équation d'Euler ( $\nu = 0$ )

En dimension 2 d'espace le tourbillon  $\nabla \wedge u(x, t)$ , perpendiculaire au plan de l'écoulement, s'identifie à un scalaire  $\omega(x, t)$  qui est transporté par le fluide selon l'équation :

$$\partial_t \omega + u \cdot \nabla_x \omega = 0$$

Ainsi on sait prouver l'existence d'une solution faible (convenablement définie) du problème d'évolution dès que le tourbillon

$$\nabla \wedge u(x, 0)$$

de la donnée initiale appartient à  $L^p$ ,  $p > 1$  ou est une mesure de signe fixe.

L'unicité et la stabilité en fonction de la donnée initiale sont établies sous des hypothèses beaucoup plus fortes :

$$\omega(., 0) = \nabla \wedge u(., 0) \in L^\infty(\Omega).$$

On utilise de manière essentielle la relation (8.87). Par contre, en accumulant des oscillations, on peut construire des solutions faibles (au sens des distributions) qui sont dans  $L^\infty(] - T, T[ \times L^2(\mathbf{R}^2))$  avec un support compact dans  $\mathbf{R}^t \times \mathbf{R}_x^2$ . Ces solutions ne vont manifestement pas satisfaire la conservation de l'énergie ((8.82) avec  $\nu = 0$ ).

En dimension 3 d'espace la situation est encore plus complexe. On sait exhiber des conditions initiales très régulières (analytiques) à l'instant  $t = 0$  et développant des singularités au bout d'un temps fini. Ces solutions ne sont pas "physiques" car leur énergie est infinie. Contrairement à ce qui se passe pour l'équation d'Euler compressible, où la formation de singularité est associée à la formation d'ondes de choc, on ne sait pas si des données initiales régulières et d'énergie finie peuvent conduire à des solutions qui, au bout d'un temps fini, présentent des singularités. Par contre, comme dans le cas compressible, on sait montrer que pour des données initiales assez régulières (comme pour le cas compressible dans  $H^{\frac{5}{2}}(\Omega)$  mais en plus à divergence nulle) on a une unique solution régulière sur un intervalle de temps de longueur au moins à l'inverse à la norme des données initiales dans cet espace.

## 8.5 Existence, unicité et stabilité de la solution de l'équation de Navier-Stokes $\nu > 0$ .

Lorsque la viscosité  $\nu > 0$  est présente on utilise l'estimation d'énergie. :

$$\frac{1}{2} \int_{\Omega} |u(x, t)|^2 dx + \nu \int_0^{\infty} \int_{\Omega} |\nabla_x u(x, s)|^2 dx ds \leq \frac{1}{2} \int_{\Omega} |u(x, 0)|^2 dx .$$

C'est le point de départ de la démarche de Leray (1933) qui a prouvé en dimension 3 l'existence de solutions faibles définies pour tout temps positif. On ignore toujours à l'heure actuelle (même pour des données initiales régulières) si ces solutions restent régulières et uniquement déterminées par les données initiales. En dimension 2 on montre (c'est beaucoup plus facile) que ces solutions sont régulières et dépendent continûment des données initiales.

Au delà des théorèmes évoqués l'analyse des équations de Navier-Stokes ou de celle d'Euler correspond à une assez grande variété de problèmes. On se propose d'en citer quelques-uns :

1 En dimension 2 d'espace, dans ouvert  $\Omega$  distinct de l'espace entier et pour des données initiales régulières, on sait analyser (prouver existence unicité et stabilité) aussi bien les équations d'Euler avec condition d'imperméabilité ( $u \cdot \vec{n} = 0$  sur le bord) que les équations de Navier-Stokes avec viscosité  $\nu > 0$  et condition d'adhérence ( $u_\nu = 0$  sur le bord).

Trouver le comportement asymptotique pour  $\nu \rightarrow 0$  de ces solutions est essentiellement un problème ouvert. La situation est naturellement encore plus complexe en dimension 3. La raison en est qu'avec  $\nu \rightarrow 0$  on ne dispose comme estimation uniforme (8.89) que de

$$\forall 0 < t < T, \int_{\Omega} |u(x, t)|^2 dx \leq \int_{\Omega} |u(x, 0)|^2 dx$$

et donc que de résultats de convergence faible dans  $L^\infty(\mathbf{R}_t; L^2(\Omega))$  ce qui est très insuffisant pour prouver que :

$$\lim_{\nu \rightarrow 0} \left( u_\nu \otimes u_\nu \right) = \lim u_\nu \otimes \lim u_\nu .$$

On comprend bien la difficulté du problème en observant les tourbillons générés à l'arrière du sillage d'un bateau. Ceux ci ne sont pas décrits par des solutions régulières de l'équation d'Euler. On voit l'écoulement passer d'un régime laminaire à un régime turbulent dès que les trajectoires se détachent du bord. A l'avant ce point de détachement on peut calculer le comportement près du bord en utilisant des équations de couche limite dites équations de Prandtl. Sur le plan mathématique on peut montrer qu'avec des données analytiques ( $\partial\Omega$  variété analytique et  $u_\nu(x, 0)$  fonction analytique) la convergence de  $u_\nu$  vers la solution de l'équation d'Euler a bien lieu durant un temps fini et, dans ce régime, les équations de Prandtl sont valables. Cependant ces hypothèses sont trop instables pour décrire des phénomènes réels et même si elles sont réalisées à l'instant initial l'énoncé ci dessus ne dit rien sur ce qui pourra se passer pour des temps plus grands, après l'apparition de singularités.

En utilisant simplement l'inégalité d'énergie on montre que, en présence d'une solution régulière de l'équation d'Euler, (en particulier pour des données initiales régulières en dimension 2), la convergence faible pour  $0 \leq t \leq T$  de  $u_\nu$  vers cette solution est équivalente à chacune des propriétés suivantes :



$$\begin{aligned}
i) \forall 0 < t \leq T, \int_{\Omega} |\lim_{\nu \rightarrow 0} u_{\nu}(x, t)|^2 dx &= \int_{\Omega} |u(x, 0)|^2 dx \\
ii) \lim_{\nu \rightarrow 0} \nu \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla_x u_{\nu}(x, t)|^2 dx dt &= 0.
\end{aligned}$$

Ainsi l'apparition de pathologies dans cette convergence est liée à une perte d'énergie dans la convergence faible.

2. Pour tout  $\nu > 0$  la version stationnaire (correspondant physiquement à des régimes permanents) des équations de Navier Stokes :

$$-\nu \Delta u_{\nu} + u_{\nu} \cdot \nabla_x u_{\nu} + \nabla_x p = f(x), \quad \nabla_x \cdot u_{\nu} = 0 \text{ dans } \Omega, u_{\nu} = 0 \text{ sur } \partial\Omega$$

admet, dans tout domaine borné, au moins une solution. On peut la construire en utilisant la version stationnaire de l'égalité d'énergie :

$$\nu \int_{\Omega} |\nabla_x u_{\nu}|^2 dx = \int_{\Omega} f(x) \cdot u_{\nu}(x) dx \leq \left( \int_{\Omega} |f(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}} \left( \int_{\Omega} f(x) |u_{\nu}(x)|^2 dx \right)^{\frac{1}{2}}$$

et l'inégalité de Poincaré (qui dit que dans un domaine borné et pour des fonctions nulles sur le bord la norme  $L^2$  des fonctions est contrôlée par la norme  $L^2$  de leur gradient). Cette solution est unique dès que  $\nu$  est assez grand. Par contre pour  $\nu \rightarrow 0$  plusieurs solutions apparaissent.

Bien entendu cette pathologie se reflète dans le comportement asymptotique (pour  $t \rightarrow 0$  et  $f$  indépendant de  $t$ ) des solutions de l'équation

$$\partial_t u - \nu \Delta u_{\nu} + u_{\nu} \cdot \nabla_x u_{\nu} + \nabla_x p = f(x), \quad \nabla_x \cdot u_{\nu} = 0, \text{ dans } \Omega, u_{\nu} = 0 \text{ sur } \partial\Omega.$$

Cette problématique est la transcription en dimension infinie de la théorie de la bifurcation pour les systèmes dynamiques. On dégage des notions d'attracteurs et on évalue leur dimension fractale. On calcule les pertes de stabilité lors des premières bifurcations en adaptant la théorie de Hopf. Cette étude sert de modèle à l'explication de rouleaux de Bénard observés dans un fluide contenu dans un récipient, chauffé en bas et refroidi en haut.

3. On observe dans des problèmes bidimensionnels, ou approximativement bidimensionnels lorsque l'épaisseur est infiniment petite par rapport aux autres dimensions du domaine, des structures cohérentes c'est à dire des solutions stationnaires ou métastables. Les exemples classiques sont la tache rouge de Jupiter ou les cyclones et anticyclones dans l'atmosphère terrestre. Dans ce régime l'équation d'Euler se réduit à :

$$u \cdot \nabla_x \omega = 0.$$

Avec une fonction courant  $\nabla_x \wedge \Psi = u$  (dont l'existence résulte de la relation  $\nabla_x \cdot u = 0$ ) (8.89) est alors équivalente à

$$\nabla_x^{\perp} \Psi \cdot \nabla_x \omega = 0$$

ce qui signifie que les lignes de niveau des fonctions scalaires  $\Psi$  et  $\omega = \nabla_x \wedge u = -\Delta\Psi$  coïncident. On obtient ainsi l'existence d'une fonction  $F$  (dans certains cas multivaluée) telle que l'on ait :

$$\omega = -\Delta\Psi = F(\Psi).$$

Ceci conduit aux questions et remarques suivantes :

- i) Peut-on déterminer la fonction  $F$  qui correspond à un écoulement ayant des propriétés données ?
- ii) L'équation (8.89) détermine-t-elle une solution stable ? A ce niveau il est essentiel de préciser la norme dans laquelle cette stabilité est mesurée. En effet on prouve que toute solution stationnaire est instable par des perturbations d'énergie finie (mais d'entrophie, norme de  $\nabla_x \wedge u$ , éventuellement infinie) et on donne des conditions suffisantes sur  $F$  pour que certaines solutions stationnaires soient stables pour des perturbations d'entrophie finie. Comme cette est réversible en temps on en déduit que pour converger vers ces solutions il faut partir de données singulières (d'entropie infinie) .

## 8.6 Les modèles de Turbulence

Les problèmes de singularités évoqués dans la section précédente, en plus de leur intérêt mathématique, jouent un rôle essentiel dans la description des phénomènes. Ils deviennent prépondérants et contribuent à la complexité de l'écoulement quand le nombre de Reynolds augmente. En pratique ce nombre est souvent très grand  $10^4$  dans les pipe-lines et dans le sillage des bateaux,  $10^6$  autour des ailes d'avion et  $10^8$  autour d'un vaisseau spatial lors de sa rentrée dans l'atmosphère. Pour palier cette difficulté on remplace l'étude d'une solution par celle d'une famille aléatoire de solutions  $u$  fluctuant autour d'un état moyen. On désigne par  $\langle . \rangle$  les moyennes ou espérances des variables aléatoires correspondantes. Tout de suite apparaît comme difficulté le fait que  $\langle u \otimes u \rangle$  n'est en général pas égal à  $\langle u \rangle \otimes \langle u \rangle$ . La différence de ces termes porte le nom de tenseur de Reynolds. Il s'agit de la contrepartie de l'observation selon laquelle avec des limites faibles on a en général

$$\lim(u_\nu \otimes u_\nu) \neq \lim(u_\nu) \otimes \lim(u_\nu).$$

Les objectifs de la théorie statistique de la turbulence sont donc de dégager des propriétés des solutions vraies en moyennes. En "espérant" que ces propriétés soient valables pour presque toute solution on les utilise systématiquement.

Une construction complète de cette théorie, en accord avec les exemples auxquels ont veut l'appliquer, est loin d'être achevée, mais les résultats (souvent formels) obtenus sont intéressants. Un des outils important est la transformée de Fourier des corrélations d'ordre 2

$$R(t, x, k) = \frac{1}{(2\pi)^n} \int_{\mathbf{R}^n} e^{-iky} \langle u(x + \frac{y}{2}) \otimes u(x - \frac{y}{2}) \rangle dy$$

qui est la version statistique de la transformée de Wigner introduite en mécanique quantique dans la Section 3.6.

Sous certaines hypothèses d'homogénéité et d'isotropie on montre dans la région  $|k| \leq \frac{1}{\nu^\alpha}$  (spectre inertiel), la relation :

$$\frac{R(t, x, k)}{|k|^2} \simeq \epsilon \nu^{\frac{2}{3}} |k|^{-\frac{5}{3}} (I - \frac{k \otimes k}{|k|^2}), \quad \epsilon = \nu \langle |\nabla_x u_\nu|^2 \rangle, \quad (8.89)$$

Il s'agit de démonstrations "phénoménologiques". Cela fournit cependant une "indication" sur la régularité des solutions et un outil pour évaluer le tenseur de Reynolds :

$$\langle u \otimes u \rangle - \langle u \rangle \otimes \langle u \rangle .$$

Cette "loi " est souvent utilisée pour tester la fiabilité des codes numériques et pour la construction de modèles "turbulents". Le plus standard est probablement le modèle  $k, \epsilon$  :

$$\partial_t u + u \nabla_x u + \nabla_x p - \nu \Delta_x u - \nabla_x \left( c_\nu \frac{k^2}{\epsilon} (\nabla_x u + {}^t \nabla_x u) \right) = 0, \quad (8.90)$$

$$\partial_t k + u \nabla_x k - \frac{c_\nu k^2}{2\epsilon} |\nabla_x u + (\nabla_x u)^t|^2 - \nabla_x \cdot \left[ c_\nu \frac{k^2}{\epsilon} \nabla_x k \right] + \epsilon = 0, \quad (8.91)$$

$$\partial_t \epsilon + u \nabla_x \epsilon - \frac{c_1 k}{2} |\nabla_x u + (\nabla_x u)^t|^2 - \nabla_x \cdot \left[ c_3 \frac{k^2}{\epsilon} \nabla_x \epsilon \right] + c_2 \frac{\epsilon^2}{k} = 0. \quad (8.92)$$

Dans ce système  $u$  désigne une vitesse "moyenne",  $\epsilon$  et  $k$  s'interprètent comme des transferts d'entropie ou d'énergie dans le spectre. Il n'existe pour l'instant aucune démonstration rigoureuse (dans aucune configuration) de ce type de modèles qui par contre sont utilisés avec succès pour la conception d'un certain nombre d'objets évoluant dans des régimes turbulents (avions par exemple). En particulier les constantes  $c_i$  sont aussi phénoménologiques et déterminées par des expériences.

On peut enfin remarquer que ces modèles coiffent la hiérarchie (8.1). Les variables  $k$  et  $\epsilon$  compensent par leur présence le fait que la variable  $u$  ne soit pas markovienne (il n'y a pas d'équation pour prédire  $u(t, x)$  pour  $t > T$  en ne connaissant que  $u(T, x)$ ) et qu'il faut, pour la moyenne, retenir certaines caractéristiques de toute l'histoire de l'écoulement.

## 9 La mécanique Moléculaire

### 9.1 L'équation de Boltzmann

Après avoir insisté sur les équations de la mécanique des fluides à l'échelle macroscopique et sur la manière dont on peut les compléter dans des échelles moins précises (modèles de turbulence) il convient de revenir au début de cette hiérarchie d'équations. Ainsi on considère un gaz de  $N$  molécules de position  $x_k(t)$  et de vitesse  $v_k(t)$  ( $1 \leq k \leq N$ ) soumis à des interactions binaires décrites par un potentiel d'interaction  $\Phi$ . L'évolution est décrite par l'hamiltonien :

$$H_N \equiv \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq N} |v_i|^2 + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|x_i - x_j|).$$

Avec les variables

$$X_N = (x_1, x_2 \dots x_N) \text{ et } V_N = (v_1, v_2 \dots v_N)$$

ce système s'écrit

$$\dot{X}_N = \frac{\partial H_N}{\partial V_N} = V_N \quad (9.93)$$

$$\dot{V}_N = -\nabla_{X_N} \left( \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|x_i - x_j|) \right). \quad (9.94)$$

Il possède les propriétés suivantes :

1 Réversibilité : si à l'instant  $t = T$  on change pour tout  $1 \leq k \leq N$  les couples  $(x_k(t), v_k(t))$  en les couples  $(x_k(t), -v_k(t))$  et si on poursuit l'évolution on retrouvera à l'instant  $t = 2T$ , en notant  $X_N^{\sim}(t)$   $V_N^{\sim}(t)$  le nouveau flot défini à partir de  $X_N^{\sim}(T) = X_N(T)$ ,  $V_N^{\sim}(T) = -V_N(T)$ ,

$$X_N^{\sim}(2T) = X_N(0), V_N^{\sim}(2T) = -V_N(0).$$

2 Indiscernabilité : L'action du flot hamiltonien commute avec l'action de toute permutation :

$$\sigma : ((x_1, v_1), (x_2, v_2), \dots, (x_N, v_N)) \mapsto ((x_{\sigma(1)}, v_{\sigma(1)}), (x_{\sigma(2)}, v_{\sigma(2)}), \dots, (x_{\sigma(N)}, v_{\sigma(N)}))$$

3 Existence de lois de conservation : Le hamiltonien

$$H(X_N, V_N) = \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq N} |v_i|^2 + \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi_N(|x_i - x_j|)$$

est conservé le long des trajectoires :

$$\frac{dH_N(X_N(t), V_N(t))}{dt} = 0$$

Il en est de même de toute fonction  $F(X_N, V_N)$  vérifiant la relation  $\{H, F\} = 0$ , ce qui caractérise les états invariants par ce système.

Enfin la solution de l'équation de Liouville associée :

$$\partial_t F + \{H, F\} = 0, \quad F(X_N, V_N, 0) = F_0(X_N, V_N)$$

est construite par l'algorithme suivant

$$F(X_N, V_N, t) = F_0(X_N(X, V, t), V_N(X, V, t))$$

où  $(X_N(X_N, V_N, t), V_N(X_N, V_N, t))$  désigne le "pied" ie la valeur en  $s = 0$  de la solution  $(X_N(s), V_N(s))$  du système hamiltonien qui à l'instant  $t$  passe par le point  $(X_N, V_N)$ .

A la fin du 19ième siècle et au début du 20ième siècle est apparu avec Maxwell, Boltzmann et Lorentz l'idée d'introduire une densité de probabilité  $f(x, v, t)$  pour faire le lien entre la description au niveau particulaire et la description macroscopique d'un gaz de particules (molécules électrons etc...);  $f$  va représenter, par exemple dans  $\mathbf{R}_x^3 \times \mathbf{R}_v^3$ , le nombre de particules qui au point  $x$  et à l'instant  $t$  sont animées de la vitesse  $v$ . En raison de la présence de la variable  $v$  ces équations sont dites cinétiques. A l'époque de Maxwell et Boltzmann on étudiait ces équations pour déduire de leur propriétés des justifications de la théorie atomique alors naissante. Depuis la raison de leur intérêt a évolué. On les utilise pour calculer les propriétés de milieux trop raréfiés pour que des équations macroscopiques soient valables. Les exemples sont nombreux et variés : *rentrée d'un véhicule spatial dans l'atmosphère en particulier quand il passe d'une atmosphère très raréfiée à l'atmosphère terrestre; évolution d'un courant dans un dispositif si petit que les électrons en le traversant n'ont pas le temps de thermaliser; évolution des neutrons dans une barre d'uranium; mouvement de polymères ou de bactéries etc...*

La plus ancienne et la plus célèbre de ces équation est probablement l'équation de Boltzmann qui fait le lien entre l'évolution moléculaire évoquée ci dessus et les équations des fluides parfaits de la Section 8. C'est aussi celle qui présente les problèmes mathématiques les plus délicats car elle est "vraiment" non linéaire. Elle met en jeu une fonction  $F(x, v, t) \geq 0$  définie pour tout  $t \geq 0$  sur l'espace des phases  $(x, v) \in \Omega \subset \mathbf{R}_x^3 \times \mathbf{R}_v^3$  (dans le présent exposé on se limite au cas  $\Omega = \mathbf{R}^3$  pour négliger les problèmes délicats d'interaction des particules avec la frontière du récipient). En l'absence d'interaction entre elles les molécules se déplacent avec leur vitesse propre ce qui donne l'équation d'advection (Liouville sans potentiel) :

$$\partial_t F + v \cdot \nabla_x F = 0.$$

L'interaction apparaît dans le second membre de (9.95) sous la forme d'un opérateur quadratique  $\mathcal{B}(F, F)$  opérant uniquement dans les variables  $v$  et indépendant de  $x$ . Il est d'une forme relativement complexe (qui se justifie par sa dérivation à partir de modèles microscopiques et par la remarque 9.1 ci dessous) et s'écrit :

$$\mathcal{B}(F, F)(v) = \iint_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (F(v')F(v'_*) - F(v)F(v_*)) q_{\Phi}((v - v_*), \omega) d\omega dv_*$$

où les vitesses  $v'$  and  $v'_*$  dites post collisions sont définies en fonction des vitesses pré collisions  $v, v_*$  et d'un vecteur unitaire  $\omega$  par les formules :

$$v' = v'(v, v_*, \omega) \equiv v - ((v - v_*) \cdot \omega) \omega \quad (9.95)$$

$$v'_* = v'_*(v, v_*, \omega) \equiv v_* + ((v - v_*) \cdot \omega) \omega \quad (9.96)$$

et où  $F_*$ ,  $F'$  et  $F'_*$  désignent respectivement  $F(v_*)$ ,  $F(v')$  et  $F(v'_*)$ . Enfin  $q_{\Phi}(v - v_*, \omega)$  est une fonction positive (dépendant du potentiel intervenant au niveau moléculaire). De part sa construction l'opérateur  $F \mapsto \mathcal{B}(F, F)$  possède les propriétés suivantes. Pour toute fonction  $F$  décroissant suffisamment rapidement pour  $|v| \rightarrow \infty$  on a la conservation de la masse du moment et de l'énergie selon les formules :

$$\int_{\mathbf{R}^3} \mathcal{B}(F, F) dv = \int_{\mathbf{R}^3} v_k \mathcal{B}(F, F) dv = \int_{\mathbf{R}^3} \frac{1}{2} |v|^2 \mathcal{B}(F, F) dv = 0.$$

De plus pour toute fonction  $0 < F \in L^1(\mathbf{R}^3)$  à décroissance rapide, telle que  $\ln F$  soit au plus à croissance polynomiale, on a :

$$\int_{\mathbf{R}^3} \mathcal{B}(F, F) \ln F dv = -\frac{1}{4} \iint_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (F'F'_* - FF_*) \ln \left( \frac{F'F'_*}{FF_*} \right) q_{\Phi}((v - v_*), \omega) d\omega dv dv_* \leq 0.$$

Enfin les conditions suivantes seront équivalentes :

$$\int_{\mathbf{R}^3} \mathcal{B}(F, F) \ln F dv = 0 \Leftrightarrow \mathcal{B}(F, F) = 0 \text{ a.e.} \Leftrightarrow F \text{ est une Maxwellienne}$$

i.e.  $F(v)$  est de la forme :

$$F(v) = M_{\rho, u, \theta}(v) := \frac{\rho}{(2\pi\theta)^{3/2}} e^{-\frac{|v-u|^2}{2\theta}} \text{ avec } \rho, \theta > 0 \text{ et } u \in \mathbf{R}^3.$$

**Remarque 9.1** On peut démontrer que tout opérateur quadratique  $F \mapsto \mathcal{B}(F)$  qui possède les propriétés ci dessus et qui est invariant par transformation Galiléenne de l'espace  $\mathbf{R}_v^3$  est (à condition de généraliser un peu la fonction  $q_\Phi(v - v^*, \omega)$  par un opérateur positif ) de la forme donnée par (9.95) ce qui confère un caractère universel à cette construction.

Pour dériver l'équation de Boltzmann à partir de la mécanique hamiltonienne on introduit en plus de  $N$ , nombre d'Avogadro-Ampère, le rayon d'action  $\sigma$  du potentiel  $\Phi$ .

Le cas des sphères dures suit l'intuition naturelle d'impenétrabilité et rentre dans le formalisme hamiltonien (9.93) et (9.94) en définissant le potentiel d'interaction par la relation

$$|x| \leq \sigma \Rightarrow \Phi(|x|) = \infty \text{ et } |x| > \sigma \Rightarrow \Phi(|x|) = 0.$$

Pour un gaz monoatomique à température et pression atmosphérique normale on a  $N \simeq 10^{20}$  molécules de gaz de rayon  $\sigma \simeq 10^{-8}$  cm dans un volume de  $1 \text{ cm}^3$ . On définit deux quantités :

1 Le volume compressé (c'est à dire le volume total occupé par les molécules si on les rangeait comme des oranges chez un épicier) :  $\mathcal{V} = N \times \frac{4\pi}{3} \times \sigma^3 \simeq 5 \cdot 10^{-4} \text{ cm}^3$ .

2 Le libre parcours moyen  $\lambda \approx \frac{1}{N \times \pi \sigma^2}$  qui, intuitivement, représente la distance moyenne de collision entre deux molécules.

Le volume compressé est  $10^{-8}$  fois plus petit que le libre parcours moyen et l'équation de Boltzmann est donc déduite de la dynamique hamiltonienne en considérant la limite :

$$N \rightarrow \infty, \sigma \rightarrow 0, \text{ et } N\sigma^2 \rightarrow \lambda > 0.$$

Les équations macroscopiques seront ensuite déduites en faisant tendre  $\lambda$  vers l'infini.

Une démonstration rigoureuse de la dérivation de l'équation de Boltzmann à partir de la dynamique des sphères dures a été donnée par Lanford. Sans penser à l'esquisser dégageons en quelques caractéristiques. Cela nous permettra d'insister sur l'apparition de l'irréversibilité et de la perte d'information qui se produisent lorsqu'on passe d'une description moléculaire à une description cinétique. L'objet de la démonstration est la solution de l'équation de Liouville

$$\partial_t F_N + \{H_N, F_N\} = 0$$

avec données initiales factorisées :

$$F_N(X_N, V_N, 0) = \prod_{1 \leq i \leq N} f_0(x_i, v_i), f_0(x, v) \geq 0, \iint f_0(x, v) dx dv = 1.$$

Ces données possèdent la propriété d'indiscernabilité, préservée par le flot. Il est donc naturel de considérer en définissant

$$\begin{aligned} X_k &= (x_1, x_2 \dots x_k) \text{ et } V_k = (v_1, v_2 \dots v_k) \\ (X_k^N, V_k^N) &= (x_{k+1}, x_{k+2}, \dots x_N, v_{k+1}, v_{k+2}, \dots v_N), \end{aligned}$$

les marginales

$$\mu_N^k(X_k, V_k) = \int_{\mathbf{R}^{6N-k}} F_N(X_k, V_k, X_k^N, V_k^N) dX_k^N dV_k^N$$

et de prouver que pour tout  $k$  fixé

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \mu_N^k(X_k, V_k, t) = \prod_{1 \leq l \leq k} f(x_l, v_l, t)$$

avec  $f$  solution de l'équation de Boltzmann (dans le cas des sphères dures) :

$$\partial_t f + v \cdot \nabla_x f = \lambda \iint_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (F(v')F(v'_*) - F(v)F(v_*)) |((v - v_*) \cdot \omega)| d\omega dv_*, f(x, v, 0) = f_0(x, v).$$

La démonstration se fait (à part plusieurs points techniques) en utilisant de manière essentielle les hypothèses et observation suivantes :

1 La donnée initiale est factorisée cf. (9.97).

2 La dynamique engendrée par ces données initiales ne contient qu'un nombre fini de collisions qui sont toutes binaires.

De ces deux hypothèses on déduit la propriété d'irréversibilité. On ne peut pas réitérer la démonstration en prenant pour données initiales  $RF(X_N, V_N, 0) \equiv F(X_N, -V_N, t)$  pour revenir de l'instant  $t$  à la configuration de l'instant zéro. En effet  $F(X_N, -V_N, t)$  n'a aucune raison d'être factorisé (bien au contraire voir ci dessous) ni de générer une dynamique n'impliquant que des collision binaires.

La propriété d'ergodicité du système se manifeste ensuite par le fait que les configurations qui ne satisfont pas aux hypothèses 1 et 2 ont une mesure (dans un sens convenable) qui tend vers zéro avec  $N$ .

Comme le système hamiltonien conserve la mesure on a

$$\begin{aligned} \iint f_0(x, v) \log f_0(x, v) dx dv &= \frac{1}{N} \iint F_N(X_N, V_N, 0) \log F_N(X_N, V_N, 0) dX_N dV_N \\ &= \frac{1}{N} \iint F_N(X_N, V_N, t) \log F_N(X_N, V_N, t) dX_N dV_N \end{aligned} \quad (9.97)$$

alors qu'avec le théorème H de Boltzman (décroissance temporelle de l'entropie au sens des mathématiciens (les physiciens utilisent le signe opposé)) on a, pour  $f(x, v, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \mu_N^1(x, v, t)$  solution de l'équation de Boltzmann,

$$\iint f(x, v, t) \log f(x, v, t) dx dv \leq \iint f_0(x, v) \log f_0(x, v) dx dv.$$

L'apparente contradiction entre (9.97) et (9.98) se lève en observant (on utilise l'inégalité de Jensen) que l'on a toujours

$$\iint \mu_N^1(x, v, t) \leq \frac{1}{N} \iint F_N(X_N, V_N, t) \log F_N(X_N, V_N, t) dX_N dV_N$$

avec égalité si et seulement si  $F_N$  est factorisé. Ainsi l'aspect chaotique du système Hamiltonien se manifeste à nouveau par le fait qu'il brise la factorisation de la donnée initiale ce qui lève un obstacle à sa convergence forte vers la solutions de l'équation de Boltzmann. On retrouve la factorisation à la limite et on parle alors de "propagation du chaos".

## 9.2 De l'équation de Boltzmann aux équations hydrodynamiques

L'apparition de l'irréversibilité au niveau de l'équation de Boltzmann va rendre l'analyse des relations entre cette équation et les équations hydrodynamiques beaucoup plus simples. On discutera ci-dessous plusieurs limites impliquant les quantités macroscopiques qui sont en fait les premiers "moments" de la densité  $F_\epsilon(x, v, t)$

$$\text{densité } \rho_\epsilon(x, t) = \int F_\epsilon(t, x, v) dv, \quad (9.98)$$

$$\text{moment } m_\epsilon(t, x, v) = \int v F_\epsilon(t, x, v) dv, \quad (9.99)$$

$$\text{énergie } E_\epsilon(x, t) = \int \frac{1}{2} |v|^2 F_\epsilon(t, x, v) dv. \quad (9.100)$$

Avec  $\rho_\epsilon(x, t)$ ,  $m_\epsilon(x, t)$  et  $E_\epsilon(x, t)$  on définit les vitesse et température macroscopiques à l'aide des formules

$$m_\epsilon(x, t) = \rho_\epsilon(x, t) u_\epsilon(x, t), \quad E_\epsilon(x, t) = \rho_\epsilon(x, t) \left( \frac{|u_\epsilon(x, t)|^2}{2} + \frac{3}{2} \theta_\epsilon(x, t) \right)$$

On introduit un paramètre "abstrait"  $\epsilon$  qui sert en fait à comparer le libre parcours moyen introduit à la section précédente, le nombre de Mach et le nombre de Reynolds introduits dans la section 8. Les différentes équations ainsi obtenues, n'épuisent pas tous les régimes "limites" de solutions de l'équation de Boltzmann. En particulier des perturbations importantes des données initiales ou des conditions aux limites (ici ignorées) conduisent à des effets différents ("ghost effect").

On va tout d'abord décrire les résultats en supposant des convergences dans des normes adaptées aux problèmes. Ensuite on évoquera les preuves complètes disponibles.

## 9.3 Dérivation de l'équation d'Euler compressible

On part de l'équation de Boltzmann avec un nombre de Knudsen de l'ordre de  $\epsilon$  et une donnée initiale maxwellienne non uniforme :

$$\partial_t F_\epsilon + v \cdot \nabla_x F_\epsilon = \frac{1}{\epsilon} \mathcal{B}(F_\epsilon, F_\epsilon), \quad F_\epsilon(x, v, 0) = \frac{\rho_0(x)}{(2\pi\theta_0(x))^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{|v-u_0(x)|^2}{2\theta_0(x)}}.$$

En multipliant par  $(1, v, \frac{1}{2}|v|^2)$  et par  $\log F_\epsilon$  et en intégrant sur l'espace des vitesses, on obtient grâce aux invariants de collision les relations :

$$\partial_t \int_{\mathbf{R}^3} F_\epsilon dv + \nabla_x \cdot \int_{\mathbf{R}^3} v F_\epsilon dv = 0, \quad (9.101)$$

$$\partial_t \int_{\mathbf{R}^3} v F_\epsilon dv + \nabla_x \cdot \int_{\mathbf{R}^3} v^{\otimes 2} F_\epsilon dv = 0, \quad (9.102)$$

$$\partial_t \int_{\mathbf{R}^3} \frac{1}{2} |v|^2 F_\epsilon dv + \nabla_x \cdot \int_{\mathbf{R}^3} v \frac{1}{2} |v|^2 F_\epsilon dv = 0, \quad (9.103)$$

$$\partial_t \int_{\mathbf{R}^3} F_\epsilon \log F_\epsilon dv + \nabla_x \cdot \int_{\mathbf{R}^3} v F_\epsilon \log F_\epsilon dv - \frac{1}{\epsilon} \int \mathcal{B}(F_\epsilon, F_\epsilon) \log(F_\epsilon) dv = 0. \quad (9.104)$$



Ce système n'est pas fermé. Les moments figurant dans les second termes des équations (9.102) et (9.103) ne s'expriment pas en fonctions des moments

$$\rho_\epsilon = \int_{\mathbf{R}^3} F_\epsilon dv, \rho_\epsilon u_\epsilon = \int_{\mathbf{R}^3} v F_\epsilon dv \text{ et } \rho_\epsilon E_\epsilon = \int_{\mathbf{R}^3} \frac{1}{2} |v|^2 F_\epsilon dv.$$

Mais en utilisant l'équation pour l'entropie (9.104) :

$$\int \mathcal{B}(F_\epsilon, F_\epsilon) \log(F_\epsilon) dv = \epsilon \left( \partial_t \int_{\mathbf{R}^3} F_\epsilon \log F_\epsilon dv + \nabla_x \cdot \int_{\mathbf{R}^3} v F_\epsilon \log F_\epsilon dv \right) = 0$$

on déduit du théorème H que  $F = \lim F_\epsilon$  est une "Maxwellienne", de paramètres  $(\rho, u, \theta)(x, t)$ . En prenant la limite des équations (9.101), (9.102) et (9.103) puis en remplaçant  $\lim F_\epsilon$  par  $M_{(\rho, u, \theta)(x, t)}(v)$  on retrouve bien les équations d'Euler compressibles des gaz parfaits de la Section 8.2. La démarche ci dessus repose uniquement sur des convergence dans des espaces de fonctions ayant une décroissance convenable pour  $|v| \rightarrow \infty$ . On n'utilise pas de convergence de dérivée ce qui est compatible avec des limites discontinues, comme des ondes de choc. Dans ce dernier cas on remarque que l'on déduit de la relation (9.104) (également par passage à la limite) l'inégalité d'entropie macroscopique :

$$\partial_t \left( \rho \log \left( \frac{\rho^{2/3}}{\theta} \right) \right) + \nabla_x \cdot \left( \rho u \log \left( \frac{\rho^{2/3}}{\theta} \right) \right) \leq 0.$$

#### 9.4 Dérivation de l'équation de Navier-Stokes compressible

L'équation d'Euler compressible ne contient aucune information sur la nature du potentiel d'interaction (qui intervient dans le cas général par le noyau  $q_\Phi$ ). Pour faire apparaître l'influence de ce potentiel on approche plus précisément la solution de l'équation de Boltzmann et on cherche des fonctions  $\tilde{\rho}_\epsilon, \tilde{u}_\epsilon, \tilde{\theta}_\epsilon$  tels que l'on ait :

$$\left| \int_{\mathbf{R}^3} F_\epsilon(x, v, t) \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{1}{2} |v|^2 \end{pmatrix} dv - \int_{\mathbf{R}^3} M_{(\tilde{\rho}_\epsilon, \tilde{u}_\epsilon, \tilde{\theta}_\epsilon)(x, t)}(v) \begin{pmatrix} 1 \\ v \\ \frac{1}{2} |v|^2 \end{pmatrix} dv \right| = O(\epsilon^2).$$

Selon une méthode due à Chapman et Enskog on prouve, en introduisant la différentielle de l'opérateur  $F \mapsto \mathcal{B}(F, F)$ , que pour que l'on ait (9.105) (en supposant que les fonctions impliquées sont uniformément régulières) il faut et il suffit que

$$\tilde{\rho}_\epsilon, \tilde{u}_\epsilon, \tilde{\theta}_\epsilon$$

soient solution d'une équation de Navier-Stokes compressible (8.76), (8.77) et (8.78). Dans ces équations la viscosité  $\mu^*(\rho, \theta)$  et la diffusivité thermique  $\kappa^*(\rho, \theta)$  sont des fonctions de la température déterminées à partir des propriétés de "section efficace"  $q_\Phi$ . C'est sur l'interprétation de mesures de ces quantités que l'on peut confirmer des hypothèses sur la structure moléculaire du gaz.

Comme  $\epsilon$  est le nombre de Knudsen on déduit de la mise sous forme sans dimension des équations (8.76), (8.77) et (8.78) la relation de Von Karman :

$$\text{Knudsen} \simeq \frac{\text{Mach}}{\text{Reynolds}}.$$

## 9.5 Dérivation de l'équation de Navier-Stokes et d'Euler incompressibles

La transcription au niveau cinétique de ces relations conduit à étudier les fluctuations d'une solution autour de la Maxwellienne absolue

$$M(v) = \frac{1}{(2\pi)^n} e^{-\frac{|v|^2}{2}}$$

avec un nombre de Strouhal et un nombre de Mach du même ordre. On considère donc des solutions  $F_\epsilon$  de l'équation :

$$\epsilon \partial_t F_\epsilon + v \cdot \nabla_x F_\epsilon = \frac{1}{\epsilon^p} \mathcal{B}(F_\epsilon, F_\epsilon),$$

avec

$$p \geq 1, \\ F_\epsilon(x, v, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} e^{-\frac{|v - \epsilon \tilde{u}_0(x)|^2}{2}}, \quad \nabla_x \cdot u_0(x) = 0.$$

En remarquant que

$$F_\epsilon = M(v)(1 + \epsilon g_\epsilon(x, v))$$

on s'intéresse à la limite de la fluctuation de vitesse :

$$\tilde{u}_\epsilon(x, v, t) = \frac{1}{\epsilon} \int_{\mathbf{R}_v^3} v F_\epsilon(x, v, t) dv = \int_{\mathbf{R}_v^3} M(v) v g_\epsilon(x, v, t) dv.$$

Encore une fois en supposant des bonnes convergences des fonctions (sans hypothèses sur les dérivées) on obtient des résultats en parfait accord avec les analyses d'échelles macroscopiques et en particulier avec la relation (9.105). Pour  $p = 1$ , ce qui correspond à un nombre de Reynolds fini,

$$\tilde{u}_\epsilon(x, v, t) = \frac{1}{\epsilon} \int_{\mathbf{R}_v^3} v F_\epsilon(x, v, t) dv \tag{9.105}$$

converge vers la solution de l'équation de Navier-Stokes incompressible :

$$\partial_t u + u \cdot \nabla_x u - \nu \Delta_x u + \nabla_x p = 0, \quad \nabla_x \cdot u = 0 \tag{9.106}$$

avec  $\nu = \mu * (1, 1)$ . Pour  $p > 1$ , ce qui correspond à un nombre de Reynolds tendant vers l'infini,  $u_\epsilon$  converge vers la solutions de l'équation d'Euler incompressible :

$$\partial_t u + u \cdot \nabla_x u + \nabla_x p = 0, \quad \nabla_x \cdot u = 0.$$

## 9.6 Démonstrations rigoureuses de convergence

Il est essentiel de remarquer que les preuves rigoureuses des énoncés des sections précédentes sont "pilotes" par les résultats mathématiques concernant les équations hydrodynamiques.

Par exemple on peut montrer deux sortes de résultats.

1 Si l'on sait que les équations d'Euler ou de Navier-Stokes admettent des solutions régulières, alors, pour des données initiales  $f_0(x, v)$ , petites perturbations de la Maxwellienne  $M_{\rho_0(x), u_0(x), \theta_0(x)}$ ,

les énoncés de convergence décrits ci dessus prennent des formes rigoureuses. Dans ce cadre la validité de la formule (9.105) est démontrée pour un intervalle de temps fini. De même, comme, avec une donnée initiale dont la norme  $H^1$  est petite par rapport à la viscosité, la solution de Navier-Stokes incompressible demeure régulière pour tout temps, on prouve la convergence de (9.105) vers la solution de (9.106).

2 Pour les applications et la compréhension physique des phénomènes, les résultats globaux en temps et qui ne dépendent que de quantités physiques (et non d'estimations strictement mathématiques et souvent non-physiques) sont essentiels. L'exemple de ce type de résultat est la construction par Leray de solutions faibles de Navier-Stokes incompressible (dites solutions de Leray). De même R. Di Perna et P.L. Lions ont construit des solutions faibles (dites renormalisées) de l'équation de Boltzmann sous la seule hypothèse que l'entropie de la donnée initiale soit finie. Ainsi dans ce cadre on peut montrer que toute suite de solution renormalisées de l'équation (??) avec  $p = 1$  converge vers une solution de Leray (Golse, Saint-Raymond). Il est intéressant de remarquer le parallèle entre les outils de base utilisés pour la construction de Leray et ceux utilisés pour la construction de la solution (de Boltzmann) renormalisée et sa convergence. Leray part de l'inégalité d'énergie (qui sera valable pour des solutions approchées)

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |u(x, t)|^2 dx + \nu \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla_x u(x, s)|^2 dx ds \leq \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \int_{\Omega} |u_0(x)|^2 dx$$

puis avec

$$\nu \int_0^t \int_{\Omega} |\nabla_x u(x, s)|^2 dx ds \leq C$$

utilise le théorème de Rellich sur la compacité de l'injection de l'espace  $H^1(\Omega)$  dans  $L^2(\Omega)$ . Pour l'équation de Boltzmann l'analogie de (9.107) est l'inégalité d'entropie :

$$\begin{aligned} & \int \int F(x, v, t) \log F(x, v, t) dx dv + \\ & \frac{1}{4} \int_0^t \int \int \int_{\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}^3 \times \mathbf{S}^2} (F' F'_* - F F_*) \ln \left( \frac{F' F'_*}{F F_*} \right) q_{\Phi}((v - v_*), \omega) d\omega dv dv_* ds \\ & \leq \int \int F(x, v, 0) \log F(x, v, 0) dx dv . \end{aligned} \tag{9.107}$$

Pour l'analogie du théorème de Rellich, on observe que les non-linéarités interviennent par des intégrales en la variable  $v$ . On utilise ensuite des théorèmes de "moyenne" qui permettent de démontrer des théorèmes de régularité en " $x$ " sur des quantités de type "moments" :

$$\int_{\mathbf{R}_v^3} F(x, v, t) \phi(v) dv .$$

## 10 La dérivation des équations de champ moyen : Vlasov et Schrödinger non linéaire

La dérivation de l'équation de Boltzmann à partir de la mécanique hamiltonienne privilégie les interactions à deux corps entre molécules.

Une situation mathématiquement différente, mais importante pour les problèmes d'électromagnétisme et de plasma, est celle où chaque particule est soumise à la "moyenne des actions des autres". Cela correspond, dans le cas de la mécanique classique, au système hamiltonien, pour les variables habituelles  $X_N = (x_1, x_2 \dots x_N)$ ,  $V_N = (v_1, v_2 \dots v_N)$ ,

$$\begin{aligned}\dot{X}_N &= V_N, & \dot{V}_N &= -\frac{1}{N} \nabla_{X_N} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|x_i - x_j|), \\ H_N &\equiv \frac{1}{2} \sum_{1 \leq i \leq N} |v_i|^2 + \frac{1}{N} \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(|x_i - x_j|), \\ \partial_t F_N + \{H_N, F_N\} &= 0\end{aligned}$$

et dans le cas de la mécanique quantique au système :

$$i\hbar \partial_t \Psi_N(X_N, t) = -\frac{\hbar^2}{2} \Delta \Psi_N(X_N, t) + \frac{1}{N} \sum_{1 \leq j < k \leq N} \Phi_N(|x_j - x_k|) \Psi_N(X_N, t), \quad (10.108)$$

$$H_N \equiv \frac{\hbar}{2} \sum_{1 \leq i \leq N} \int |\nabla_{x_i} \Psi|^2 dX_N + \frac{1}{N} \int \sum_{1 \leq i < j \leq N} \Phi(x_i - x_j) |\Psi(X_N)|^2 dX_N. \quad (10.109)$$

Les asymptotiques  $N \rightarrow \infty$  sont décrites dans le cas classique par l'équation (cinétique) de Vlasov :

$$\partial_t f(x, v, t) + v \cdot \nabla_x f(x, v, t) - \nabla_x \left( \iint \Phi(x - y) f(y, v, t) dv dy \right) \nabla_v f(x, v, t) = 0 \quad (10.110)$$

et dans le cas quantique par l'équation de Schrödinger  $\Phi$ -non linéaire :

$$i\hbar \partial_t \psi = \frac{\hbar^2}{2} \Delta_x \psi + \left( \int \Phi(x - y) |\psi(y)|^2 dy \right) \psi. \quad (10.111)$$

Toutes les équations ci-dessus sont réversibles en temps. Aucune perte de réversibilité n'apparaît dans le passage à la limite, contrairement à ce qui se passe dans la dérivation de l'équation de Boltzmann. Néanmoins, sur le plan mathématique, le prix à payer est une grande complication des dérivations vers le macroscopique. Il n'existe plus de formalisation mathématique de la relaxation vers un équilibre thermodynamique. Au mieux de notre connaissance, il n'existe aucun début de justification des équations macroscopiques à partir de l'équation de Vlasov, ce qui n'empêche pas plusieurs modèles d'être utilisés.

Aussi bien dans le cas classique que quantique on considère des données initiales factorisées :

$$F_0(X_N, V_N) = \prod_{1 \leq i \leq N} f_0(x_i, v_i), \quad f_0(x, v) \geq 0 \quad \iint f_0(x, v) dx dv = 1, \quad (10.112)$$

$$\Psi_0(X_N) = \prod_{1 \leq i \leq N} \psi_0(x_i) \quad \int |\psi_0(x)|^2 dx = 1. \quad (10.113)$$

Dans le cas classique, comme pour la dérivation de l'équation de Boltzmann, la convergence s'observe sur les marginales :

$$\mu_N^k(X_k, V_k, t) = \iint F(X_k, X_k^N, V_k, V_k^N) dX_k^N dV_k^N$$

converge vers

$$\prod_{1 \leq i \leq N} f(x_i, v_i, t)$$

avec  $f(x, v, t)$  solution de l'équation de Vlasov.

Dans le cas quantique l'opérateur  $[\Psi \otimes \Psi]_{:k}$  de noyau

$$\int \Psi(X_k, Z_k^N) \overline{\Psi(X_k, Z_k^N)} dZ_k^N,$$

marginale du projecteur orthogonal sur la fonction d'onde à  $N$  particules, dans l'esprit de la section (3.6), converge vers l'opérateur de noyau

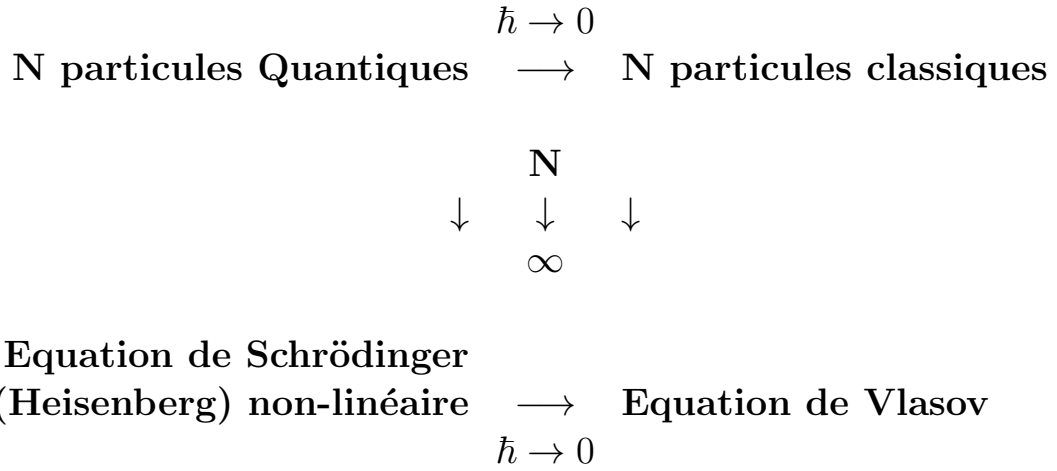
$$\prod_{1 \leq i \leq k} \psi(x_i, t) \overline{\psi(y_i, t)}$$

avec  $\psi(x, t)$  solution de l'équation de Schrödinger  $\Phi$ -nonlinéaire.

Dans le cas classique, bien que l'on sache étudier l'équation de Vlasov avec des potentiels ayant des singularités physiques (coulombien) on ne dispose de démonstrations complètes de convergence que si le potentiel est lipschitzien (ce qui est presque indispensable pour définir les solutions du système classique). Dans le cas quantique la démonstration est simple pour des potentiels d'interaction  $\Phi \in L^\infty$ . Elle est plus délicate pour le coulombien. Enfin on peut l'adapter au cas où  $\Phi$  dépend de  $N$  et converge vers  $\delta$  quand  $N \rightarrow 0$ . On observe alors que la limite est donnée par la solution de l'équation de Schrödinger non linéaire :

$$i\hbar\partial_t\psi = \frac{\hbar^2}{2}\Delta_x\psi + |\psi|^2\psi.$$

On peut résumer un certain nombre de considérations des sections précédentes par le tableau suivant (valable pour des potentiels réguliers) :



## 11 L'équation de Kortweg et De Vries (KdV) et les systèmes intégrables

### 11.1 Introduction

L'origine de l'équation de KdV remonte à une observation de Scott Russell en 1865, qui remarqua sur un canal une onde de surface créée par le choc de deux péniches. Il fut frappé par la stabilité de l'onde émise et raconte qu'il put la suivre à cheval pendant plusieurs kilomètres. En 1895 Kortweg et De Vries obtinrent à l'aide de méthodes asymptotiques l'équation

$$\partial_t u + 6u \nabla_x u + \nabla_x^3 u = 0.$$

On peut vérifier à la main que toute onde de la forme

$$u(x, t) = \frac{c}{2} \frac{1}{ch^2 \frac{\sqrt{c}}{2}(x - ct)} \text{ avec } c > 0 \text{ quelconque}$$

satisfait bien l'équation (11.114).

Les solutions de la forme  $u(x, t) = U(x - ct)$  sont appelées solitons. L'existence et la stabilité de ce type de solutions qui se propagent sans se déformer peut s'expliquer par la compétition entre le terme  $u \nabla_x u$  qui conduit à des ondes de chocs (comme pour l'équation de Burger (2.13)) et le terme  $\nabla_x^3 u$  qui produit un effet de dispersion. Il est important de remarquer, dans la formule (11.114), que la vitesse de l'onde dépend de sa taille, ce qui est fondamentalement différent de la propagation dans les problèmes linéaires.

Les propriétés qualitatives des solutions solitoniques de cette équation furent tout d'abord découvertes par des simulations numériques (parmi les premières utilisation "mathématiques" des ordinateurs). On observa deux types de comportements :

1) Dans une configuration périodique en espace (préservée par l'équation) la solution est une fonction presque périodique en temps.

2) Sur la droite entière avec une donnée initiale tendant vers zéro avec  $x \rightarrow \pm\infty$ , la solution se décompose pour  $t \rightarrow \pm\infty$  en une somme finie de solitons. Pour  $t$  tendant vers  $-\infty$  ce sont le plus grands qui sont les premiers et les plus petits les derniers. Au cours de l'évolution les plus grands rattrapent les plus petits. Pour  $t \rightarrow \infty$  l'ordre des solitons est inversé.

## 11.2 La paire de Lax et la méthode de Gelfand-Levitan-Marchenko

L'analyse complète de ce comportement a été donnée par Lax (1968). Décrivons la méthode dans l'espace entier : on introduit 2 opérateurs auxiliaires  $H(t)$  ET  $L(t)$  (on parle de paire de Lax).

$$H(t)\phi = -\partial_x^2\phi - u(x, t)\phi \quad (11.114)$$

$$L(t)\phi = \partial_x^3\phi - \frac{3}{4}(u(x, t)\nabla_x\phi + \nabla_x(u(x, t)\phi)) \quad (11.115)$$

Dans  $L^2(\mathbf{R}_x)$  l'opérateur  $H(t)$  est autoadjoint et l'opérateur  $L(t)$  antiadjoint. Ainsi la solution de l'équation :

$$\partial_t\psi = L(t)\psi, \psi(x, 0) = \phi(x).$$

est donnée par  $\psi = U(t)\phi$  avec  $U(t)$  un opérateur unitaire dans  $L^2(\mathbf{R})$ . La relation

$$U^*(t)H(t)U(t) = H(0) \Leftrightarrow 0 = \frac{d}{dt}(U^*(t)H(t)U(t)) \Leftrightarrow \frac{dH}{dt} = L(t)H(t) - H(t)L(t),$$

c'est à dire :

$$\dot{H} = [L, H], \quad (11.116)$$

est alors équivalente au fait que  $u(x, t)$  soit solution de l'équation de KdV (11.114).

Le progrès accompli repose sur les ingrédients suivants :

1 La relation (11.116) conduit à utiliser l'analyse spectrale de l'opérateur  $H(t)$ . Tout d'abord on remarque que, bien que  $L(t)$  dépende du temps et de la solution, le spectre de  $H(t)$  ne dépend pas du temps (section (3.6)).

Ce spectre est formé de l'intervalle  $[0, \infty[$  et d'une suite de valeurs propres  $\lambda_k < 0$  (comme dans l'exemple 3 de la Section 3.1.3). Pour tout  $\xi^2 \in \mathbf{R}_+$  il existe une unique solution  $\phi_\xi$  de l'équation

$$-\partial_x^2\phi_\xi + u(x, t)\phi_\xi = \xi^2\phi_\xi$$

dont le comportement asymptotique est donné par :

$$\phi_\xi(x, t) = \begin{cases} e^{-ix\xi} + R(\xi, t) & \text{pour } x \rightarrow -\infty, \\ T(\xi, t)e^{-ix\xi} & \text{pour } x \rightarrow \infty. \end{cases}$$

Les lettres  $R$  et  $T$  réfèrent aux mots réflexion et transmission en liaison avec l'interprétation physique de cette construction. Pour toute valeur propre  $\lambda_k$  il existe un unique vecteur propre  $\phi_k$  de norme 1. Sont comportement pour  $|x| \rightarrow \infty$  est donné par

$$\phi_k(x, t) \underset{x \rightarrow \pm\infty}{\simeq} C_k^\pm(t) e^{-\sqrt{-\lambda_k}|x|}.$$

Les données dites *de scattering*

$$R(\xi, 0), T(\xi, 0), \lambda_k(0) \text{ et } C_k^+(0)$$

sont déterminée à partir de la donnée initiales  $u(x, 0)$ .

2 Comme pour  $|x| \rightarrow \infty$  la solution  $u(x, t)$  tend vers zéro, les opérateurs  $H(t)$  et  $L(t)$  sont équivalents dans cette limite aux opérateurs  $-\nabla_x^2$  et  $\nabla_x^3$  et (11.116) permet ainsi de déterminer l'évolution de ces données de scattering selon les formules :

$$\lambda_k(t) = \lambda_k(0), C_k^+(t) = C_k^+(0)e^{4(-\lambda_k)\frac{3}{2}t}, \quad (11.117)$$

$$T(\xi, t) = T(\xi, 0), R(\xi, t) = R(\xi, 0)e^{8i\xi^3 t}. \quad (11.118)$$

3 Enfin il a été observé et démontré par Gelfand-Levitan-Marchenko que les données de scattering permettait par des formules intégrales explicite de retrouver le potentiel. Cette démarche porte le nom de méthode inverse. Elle est d'ailleurs utilisée dans plusieurs secteurs des mathématiques appliquées pour identifier des potentiels a partir du rayonnement des ondes. Ainsi on dispose des outils permettant d'explicitier le comportement des solutions.

### 11.3 Intégrabilité de l'équation de KdV et systèmes Hamiltoniens en dimension infinie

L'évolution (11.117) s'exprime de la façon suivante :

$$(\lambda_k(t), T(\xi, t)) = (\lambda_k(0), T(\xi, 0)) \quad (11.119)$$

$$(\log C_k^+(t), \log R(\xi, t)) = (\log C_k^+(0) + 4(-\lambda_k)\frac{3}{2}t, \log R(\xi, 0) + 8i\xi^3 t) \quad (11.120)$$

Par analogie avec la construction des coordonnées "action-angles" en mécanique classique on dit que l'on a globalement intégré l'équation de KdV. Cette situation est formellement équivalente au *Théorème de Liouville* dont nous rappelons l'énoncé ci dessous. On considère dans  $\mathbf{R}^{2n}$  ensemble des couples  $(p, q)$  un système hamiltonien :

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q}, \frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \text{ ou } \frac{dU}{dt} = J \frac{\partial H}{\partial U} \quad (11.121)$$

$$\text{avec } U = (p, q), J = \begin{pmatrix} 0, -1 \\ 1, 0 \end{pmatrix} \quad (11.122)$$

et on dit qu'une famille  $E_k(p, q), 1 \leq k \leq m$  de fonctions de  $\mathbf{R}^{2n}$  à valeur dans  $\mathbf{R}$  sont linéairement indépendantes et en involution si les deux conditions suivantes sont satisfaites :

1 L'application tangente

$$(p, q) \mapsto (E_1, E_2, \dots, E_m)$$

est de rang  $m$ .



2 Pour tout couple  $k, l$  d'indices on a la relation :

$$\sum_{1 \leq i \leq n} \frac{\partial E_k}{\partial p_i} \frac{\partial E_l}{\partial q_i} - \frac{\partial E_l}{\partial p_i} \frac{\partial E_k}{\partial q_i} = 0.$$

Le théorème de Liouville énonce que tout système Hamiltonien possédant  $n$  intégrales premières linéairement indépendantes et en involution est *complètement intégrable*

Ici on remplace  $\mathbf{R}^{2n}$  par l'espace de Sobolev  $H^1(\mathbf{R})$ . On généralise pour les fonctions de  $H^1(\mathbf{R})$  la notion de gradient (on parle de dérivée au sens de Gateaux) et la structure en involution en remplaçant la matrice antiadjointe  $J$  par l'opérateur  $\nabla_x$ . On introduit la fonctionnelle :

$$H(u) = \int_{-\infty}^{\infty} (-u^3 + \frac{1}{2}u_x^2) dx$$

et on vérifie que l'équation de KdV est équivalente à l'équation

$$\partial_t u = \nabla_x \left( \frac{\partial H(u)}{\partial u} \right).$$

Contrairement à l'énoncé en dimension finie on dispose maintenant d'une infinité de fonctionnelles. Ainsi l'équation de KdV fournit un exemple qui satisfait à la fois les hypothèses et les conclusions d'un théorème de Liouville en dimension infinie. Un énoncé rigoureux avec démonstration n'est cependant pas encore disponible, ce qui est dû au fait qu'il est difficile de caractériser un système infini et complet de fonctionnelles en involution.

## 11.4 Généralisations

A première vue, en raison de tous les calculs explicites conduisant, entre autre, à l'intégrabilité complète, l'équation de KdV pourrait sembler trop particulière pour figurer dans ce texte. Il faut cependant observer qu'il s'agit d'un exemple fondamental, car une partie (et parfois même la totalité) des méthodes décrites ici s'appliquent à d'autres équations qui interviennent aussi bien en physique qu'en mathématiques. Donnons quelques exemples : l'équation de Kortweg et de Vries modifiée pour les ondes d'Alfvén dans les plasmas froids, l'équation de Schrödinger non-linéaire pour les ondes de surface et la focalisation des faisceaux.

## 12 Les équations de l'élasticité

### 12.1 Introduction

Les solides, comme les fluides, sont des milieux continus. Cette similarité fait que les équations correspondantes ont été dérivées simultanément. Les équations de l'élasticité apparaissent déjà dans Euler (1755) ; ce sont des équations hyperboliques non-linéaires qui traduisent les lois de conservation des masse, moment cinétique et énergie. On introduit une fonction  $u(x, t) \in R^d$  qui représente la position à l'instant  $t$  de l'élément de volume (en dimension  $d$  d'espace), qui à l'instant  $t = 0$  est

au point  $x$ . Si l'on suppose que les seules forces agissant sur le milieu dépendent uniquement du déplacement (densité et température constante), les équations de Newton pour ce déplacement se réduisent au système établi par Cauchy et Poisson :

$$\partial_t^2 u(x, t) = \nabla_x \cdot (\sigma(u(x, t) - x))$$

Dans (12.123)  $\sigma(\cdot)$  est une fonction de  $\mathbf{R}^d$  à valeur  $d \times d$  matricielles dite tenseur des contraintes. En coordonnées (12.123) s'écrit :

$$\partial_t^2 u_i(x, t) = \sum_j \partial_{x_j} (\sigma_{ij}(u(x, t) - x))$$

## 12.2 Equations linéarisées et propriétés spécifiques

On suppose que le tenseur des contraintes  $\sigma$  satisfait des hypothèses d'isotropie ; alors, tant que  $u(x, t) - x$  reste petit on peut approximer  $\sigma$  par

$$\sigma_{ij}(u) = \lambda(\nabla_x \cdot u)\delta_{ij} + \mu(\partial_{x_i} u_j + \partial_{x_j} u_i).$$

Les coefficients  $\lambda$  et  $\mu$  (constants si le milieu  $\Omega$  est homogène et de densité  $\rho = 1$ ) sont dites constantes de Lamé.  $\mu$  est positif,  $\lambda$  peut être de signe quelconque, mais on suppose toujours que l'on a :

$$0 < 3\lambda + 2\mu \quad \text{ce qui implique} \quad 0 < \mu < \lambda + 2\mu.$$

En présence d'une force extérieure  $F$  de coordonnées  $f_i$  l'équation de Newton s'écrit

$$\rho \partial_t^2 u_i = \sum_j \partial_{x_j} (\sigma_{ij}) + \rho f_i = \sum_j \lambda \nabla_x \cdot u \delta_{ij} + \mu (\partial_{x_i} u_j + \partial_{x_j} u_i) + \rho f_i.$$

En multipliant l'équation (12.123) et en intégrant par partie on fait apparaître l'énergie comme somme d'une énergie cinétique et d'une énergie potentielle. En l'absence de force extérieure et d'effet de bord cette énergie  $\mathcal{E}(u)$  est un invariant du mouvement ; on a :

$$0 = \frac{d\mathcal{E}(u)}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \int \frac{1}{2} |\partial_t u(x, t)|^2 dx + \int \left( \frac{\lambda + 2\mu}{2} |\nabla_x \cdot u|^2 + \mu \sum_{i \neq j} \left( \frac{\partial_{x_i} u_j + \partial_{x_j} u_i}{2} \right)^2 \right) dx \right).$$

En présence d'effet de bord (frontière), dans un domaine  $\Omega$ , il convient de préciser des conditions aux limites qui décrivent les forces exercées sur les parois du domaine. Les cas les plus classiques correspondent à :

- i) la plaque encastree ( $u = 0$  sur  $\partial\Omega$ ), ce qui généralise la condition de Dirichlet pour le cas scalaire,
- ii) l'absence de force de traction sur le bord du domaine, ce qui correspond (avec  $\vec{n} = (n_1, n_2, n_3)$ ) à la condition :

$$\frac{\lambda + 2\mu}{2} (\nabla_x \cdot u) n_i + \mu \sum_{j \neq i} \left( \frac{n_i u_j + n_j u_i}{2} \right) n_j = 0.$$

Cette dernière condition se déduit d'une formulation variationnelle du problème sur l'espace  $(H^1(\Omega))^3$  comme dans le cas scalaire (cf. section 5) mais elle n'est pas équivalente à une condition de Neumann sur chacune des composantes du vecteur  $u$ . C'est avec cette condition aux limites que les équations de l'élasticité exhibent les propriétés les plus caractéristiques. C'est donc celle qui sera prise en compte dans la suite. Avec la représentation de Clebsch du déplacement

$$u(x, t) = \nabla\phi + \nabla \wedge \psi,$$

on décompose l'équation (12.123) en un système de deux équations (la première scalaire en  $\phi$  et la seconde vectorielle en  $\psi$ )

$$\partial_t^2\phi - c_L^2\Delta\phi = 0, c_L^2 = (\lambda + 2\mu), \quad (12.123)$$

$$\partial_t^2\psi - c_S^2\Delta\psi = 0, c_S^2 = \mu, \quad (12.124)$$

$$0 < c_L = \sqrt{\mu} < c_S = \sqrt{\lambda + 2\mu}. \quad (12.125)$$

(12.123) et (12.124) sont des équations des ondes standard. Tous les théorèmes de propagation énoncés pour les ondes sont donc valables, en particulier ceux qui concernent la propagation des singularités (hautes fréquences) et ceux qui concernent la propagation des ondes planes se propageant dans la direction  $\omega$

$$\phi(x.\omega - c_L t) \text{ et } \psi(x.\omega - c_S t).$$

Ces deux familles de solutions génèrent des ondes qui oscillent longitudinalement dans le premier cas et transversalement dans le second. On parle d'ondes longitudinales et d'ondes transverses.

La spécificité de l'élasticité apparaît dans l'interaction avec la frontière du domaine ou à l'interface entre deux domaines ayant des coefficients  $\lambda$  et  $\mu$  différents. On se limite à décrire l'interaction avec le bord en l'absence de *force de traction*. Pour analyser la structure du problème on considérons des ondes planes dans le demi plan  $x_2 < 0$ . Cela nous ramène au cas où ces solutions sont de la forme

$$u(x) = (u_1(x_1, x_2), u_2(x_1, x_2), 0)$$

c'est à dire dans le plan  $(x_1, x_2)$  et indépendantes de la variable  $x_3$ . La condition d'absence de traction en  $x_2 = 0$  s'écrit alors

$$\partial_{x_1}u_1(x_1, 0) + \partial_{x_2}u_2(x_1, 0) = 0 \text{ et } \partial_{x_2}u_1(x_1, 0) + \partial_{x_1}u_2(x_1, 0) = 0.$$

Pour étudier la réflexion d'une onde plane transverse ou longitudinale on construit la solution sous forme de la somme d'une onde incidente et de une ou deux ondes réfléchies choisies de manière à satisfaire la condition(12.126). Des calculs complètement explicites montrent qu'en général une onde plane (transverse ou longitudinale) se réfléchit en la somme de deux ondes, l'une transverse l'autre longitudinale. On parle de couplage d'onde et dans les cas limites, par exemple si l'onde longitudinale se transforme en une onde transverse, de couplage de mode.

Une propriété encore plus spécifique des équations de l'élasticité est l'existence, en l'absence de force de traction, d'ondes de surface dites ondes de Rayleigh. Avec la représentation (12.123) on construit

une solution de la forme suivante :

$$u(x, t) = C \nabla (e^{b_1 x_2} e^{ik(x_1 - ct)}) + D \nabla \wedge (e^{b_2 x_2} e^{ik(x_1 - ct)}) \quad (12.126)$$

$$b_1 = |k| \left(1 - \frac{c^2}{c_L^2}\right)^{\frac{1}{2}}, \quad b_2 = |k| \left(1 - \frac{c^2}{c_S^2}\right)^{\frac{1}{2}}. \quad (12.127)$$

Il suffit donc de choisir  $c$  inférieur à  $c_L$  et  $c_S$  pour avoir une solution qui se localise près du bord lorsque la fréquence  $k \rightarrow \infty$ , en oscillant dans la direction  $x_1$  avec la même fréquence. Il reste à vérifier les conditions (12.126) C'est à dire un système homogène et linéaire  $2 \times 2$  en  $C$  et  $D$ . Ce système admet une solution non triviale si et seulement si son déterminant

$$\left(2 - \frac{c^2}{c_S^2}\right)^2 - 4 \left(1 - \frac{c^2}{c_S^2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{c^2}{c_L^2}\right)^{\frac{1}{2}} = 0.$$

Et en effet on montre que (12.128) possède une solution  $0 < c < c_T < c_S$ .

Cette propriété se manifeste lors de tremblements de terre. On observe l'arrivée successive de trois ondes et c'est l'onde de Rayleigh, qui arrive la dernière car c'est elle qui est de plus petite vitesse, qui génère le maximum de dégâts en étant localisée près du bord.

L'analyse ci-dessus a été faite à coefficients constants dans le demi espace et avec des ondes planes. Néanmoins, comme pour l'équation des ondes de la Section 7.5, des constructions asymptotiques à hautes fréquences sont réalisables systématiquement dans un domaine quelconque avec une frontière "courbe" et des coefficients de Lamé variables. Dans ce cadre on montre l'existence de solutions qui se concentrent le long des rayons correspondant aux ondes longitudinales et transverses, et qui se réfléchissent au bord avec des phénomènes de couplage ou de conversion de mode. On montre aussi l'existence de solutions qui se concentrent sur le bord de façon analogue aux ondes de Rayleigh exposées ci-dessus.

### 12.3 Equation d'Euler Bernouilly et de Timoshenko

Ainsi l'adaptation des calculs, faits sur des ondes planes, à des situation plus générales repose sur une asymptotique à haute fréquence. Ce qui veut en dire particulier dire que les longueurs caractéristiques du domaine doivent être assez grandes par rapport à la longueur d'onde des oscillations. Pour des poutres ou des plaques on n'est absolument pas dans cette situation : il y a au contraire un paramètre  $\epsilon$  qui s'impose comme étant petit (la surface de la poutre ou l'épaisseur de la plaque) qui s'impose. Dans ce cadre, en un certain sens complémentaire de celui évoqué pour mettre en évidence des ondes de Rayleigh en milieu non homogène avec frontière courbe, on démontre que l'équation d'Euler Bernouilly

$$\partial_t^2 u(x, t) + c \partial_x^4 u(x, t) = 0 \text{ pour les poutres} \quad (12.128)$$

$$\partial_t^2 u(x, t) + (\Delta_{x,y})^2 u(x, t) = 0 \text{ pour les plaques} \quad (12.129)$$

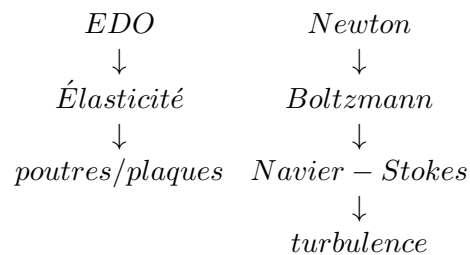
fournit une approximation de l'évolution pour  $\epsilon \rightarrow 0$  et pour des oscillations à basse fréquence. L'analyse ci-dessus s'adapte aussi à des objets plus complexes (coques).

## 13 Conclusion

Ce texte ne peut pas, et ne veut pas, être exhaustif. Les choix effectués dépendent cruciallement du goût et des compétences de ses auteurs.

La méthodologie utilisée nous a conduit à insister sur les aspects d'échelle (ordre de grandeurs). Les phénomènes distribués présentés ici font appel à des groupement d'échelles sources d'effets non-linéaires. L'analyse d'échelles et la réduction dimensionnelle conduisent à des non-linéarité.

Présentons un tableau :



que nous allons commenter. Ce tableau suit de haut en bas une analyse cartésienne et non historique. Il faut remarquer que ce sont, bien entendu, les équations macroscopiques qui ont été établies les premières. Cela s'illustre bien avec les équations de poutres et plaques établies par Bernouilly, Sophie Germain et Cauchy, avant que ne soient écrites les équations fondamentales de l'élasticité qui se déduisent, elle, de la mécanique newtonnienne.

De même les équations de Navier ont été établies bien avant celle de Boltzmann, le rôle primitif de l'équation de Boltzmann étant de conforter l'hypothèse atomique. en particulier en observant que les coefficients de diffusion et dissipation thermiques déduits de cette équation étaient en conformité avec l'observation macroscopique.

De nos jours le rôle des équations cinétiques de type Boltzmann est devenu depuis peu beaucoup plus technologique. Il ne s'agit plus de justifier un modèle moléculaire, mais bien d'appréhender des propriétés fines de milieux raréfiés (rentrée dans l'atmosphère d'un véhicule spatial, propagation du courant dans un dispositif microscopique, ionisation de l'air entre un CD et sa tête de lecture).

Mentionnons pour finir le manque de mathématisation de la théorie de la turbulence, pourtant systématiquement utilisée (météo etc) qui se trouve tout à fait en bas du tableau précédent.

## Références

- [1] V. Arnol'd, "Méthodes mathématiques de la mécanique classique", MIR, Moscou, 1976.
- [2] S. Alinhac et P. Gérard, "Opérateurs pseudo-différentiels et théorème de Nash-Moser", InterEditions-CNRS, Paris, 1991.
- [3] F. Berezin et M. Shubin, "The Schrödinger equation", Kluwer, London, 1991
- [4] H. Brezis, "Analyse fonctionnelle : théorie et applications", Masson, paris 1983.

- [5] C. Cercignani, “Ludwig Boltzmann : the man who trusted atoms”, Oxford University Press, Oxford, 1998.
- [6] R. Courant et D. Hilbert, “Methods of mathematical physics”, Interscience Publishers, New-York, 1953.
- [7] R. Dautray et J.L. Lions, “Analyse Mathématique et Calcul Numérique pour les Sciences et Techniques”, 9 Tomes, Paris, Masson, 1984/1987.
- [8] L. Evans, “Partial differential equations”, American mathematical society, Providence RI, 1998.
- [9] L. Landau et E. Lifshitz, “Physique théorique, T. VII : théorie de l’élasticité”, MIR, Moscou, 1967.
- [10] P.L. Lions et E. Magnes, “Problèmes aux limites non homogènes et applications”, Dunod, Paris 1970.
- [11] G. Meurant, “Méthodes de Krylov pour la résolution des systèmes linéaires”, Encyclopédie des Techniques de l’Ingénieur, article AF488.
- [12] D. Robert, “Autour de l’approximation semiclassique”, Birkhäuser, Boston, 1987.
- [13] L. Schwartz, “Méthodes mathématiques pour les sciences physiques”, Hermann, Paris, 1965.
- [14] D. Serre, “Systèmes de lois de conservation I et II”, Diderot Editeur, Paris, 1996.
- [15] W. Strauss, “Partial Differential Equations : An Introduction”, Wiley and Sons, New York, 1992.
- [16] M. Taylor, “Partial differential equations, I, II et III”, Springer, Berlin, 1996.
- [17] G. Whitham, “Linear and nonlinear waves”, Wiley, New-York, 1974.