Méthodes variationnelles en physique quantique

M2 ANEDP

Examen du 11 mai 2012

Ce problème traite de la théorie des perturbations dans un cadre linéaire, puis non-linéaire. Les deux parties qui le composent sont indépendantes.

Partie I. Perturbations linéaires

Dans cette partie, $\mathcal{H}$ désigne un espace de Hilbert, muni du produit scalaire $(\cdot,\cdot)_{\mathcal{H}}$ et de la norme associée $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$, et on note $\|\cdot\|$ la norme d'opérateur sur $\mathcal{L}(\mathcal{H})$:

$$\forall T \in \mathcal{L}(\mathcal{H}), \quad \|T\| = \sup_{v \in \mathcal{H}\setminus\{0\}} \frac{\|Tv\|_{\mathcal{H}}}{\|v\|_{\mathcal{H}}}.$$

Pour tout opérateur linéaire fermé T sur $\mathcal{H}$, on note $\rho(T)$ l'ensemble résolvant de T, et $\sigma(T)$ son spectre, et pour tout $z \in \rho(T)$, on pose $R_T(z) = (z-T)^{-1}$. On rappelle que la fonction $z \mapsto R_T(z)$ est analytique sur $\rho(T)$.

Soit A un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$ de domaine $D(A)$ et B un opérateur symétrique sur $\mathcal{H}$ de domaine $D(B)$ tel que $D(A) \subset D(B)$, vérifiant

$$\exists 0 \le \alpha < 1, \quad \exists C \in \mathbb{R}_+ \quad \text{tel que} \quad \forall u \in D(B), \quad \|Bu\|_{\mathcal{H}} \le \alpha \|Au\|_{\mathcal{H}} + C\|u\|_{\mathcal{H}}.$$

On rappelle que $A+B$ définit alors un opérateur auto-adjoint sur $\mathcal{H}$ de domaine $D(A)$.

Question 1.

1a. Soit $z \in \rho(A)$. Vérifier que $BR_A(z) \in \mathcal{L}(\mathcal{H})$ et montrer que si $\|BR_A(z)\| < 1$, alors $z \in \rho(A+B)$.

1b. Montrer que sous l'hypothèse $\|BR_A(z)\| < 1$,

$$R_{A+B}(z) = R_A(z) + R_A(z)BR_{A+B}(z).$$

1c. En déduire que, toujours sous l'hypothèse $\|BR_A(z)\| < 1$,

$$R_{A+B}(z) = R_A(z) + R_A(z)BR_A(z) + R_A(z)BR_A(z)BR_A(z) + ...$$

la série ci-dessus étant normalement convergence dans $\mathcal{L}(\mathcal{H})$, et que

$$\|R_{A+B}(z)\| \le \frac{\|R_A(z)\|}{1 - \|BR_A(z)\|}.$$

Question 2. Soit λ_0 une valeur propre simple isolée de A. On pose

$$r = \frac{1}{2}\text{dist}\,(\lambda_0, \sigma(A) \setminus \{\lambda_0\}) > 0,$$

et on note $\mathcal{C}$ le cercle du plan complexe de centre λ_0 et de rayon r. On rappelle que la notation

$$\oint_{\mathcal{C}} f(z)\,dz$$

désigne l'intégrale de contour

$$\oint_{\mathcal{C}} f(z)\,dz := \int_0^{2\pi} f(\lambda_0 + re^{i\theta}) rie^{i\theta}\,d\theta,$$

et que la formule de Cauchy s'écrit

$$\forall \mu \in \mathbb{C}, \quad \frac{1}{2i\pi}\oint_{\mathcal{C}} \frac{1}{z-\mu}\,dz = \left| \begin{array}{lll} 1 & \text{si} & |\mu - \lambda_0| < r, \\ 1/2 & \text{si} & |\mu - \lambda_0| = r, \\ 0 & \text{si} & |\mu - \lambda_0| > r. \end{array} \right.$$

2a. Montrer qu'il existe $\eta_0 > 0$ tel que pour tout $-\eta_0 < \eta < \eta_0$, on ait $\mathcal{C} \subset \rho(A + \eta B)$.

2b. Pour $-\eta_0 < \eta < \eta_0$, on pose

$$P_\eta = \frac{1}{2i\pi}\oint_{\mathcal{C}} R_{A+\eta B}(z)\,dz.$$

A l'aide du calcul fonctionnel, montrer que P_η est un projecteur orthogonal et caractériser son image.

2c. Montrer que la fonction $\eta \mapsto P_\eta$ est réelle analytique au voisinage de 0, c'est-à-dire qu'il existe une suite $(T_n)_{n\in\mathbb{N}} \in (\mathcal{L}(\mathcal{H}))^{\mathbb{N}}$ telle que

$$\forall -\eta_0 < \eta < \eta_0, \quad P_\eta = \sum_{n\in\mathbb{N}} \eta^n T_n,$$

cette série étant normalement convergente dans $\mathcal{L}(\mathcal{H})$. On explicitera les opérateurs T_n en fonction de B et de la résolvante de A.

2d. On admet que si P et Q sont deux projecteurs orthogonaux de $\mathcal{L}(\mathcal{H})$ vérifiant $\|P - Q\| < 1$, alors P et Q ont même rang. En déduire que pour tout $-\eta_0 < \eta < \eta_0$, l'ensemble $\sigma(A+\eta B) \cap [-\lambda_0 - r, \lambda_0 + r]$ est un singleton $\{\lambda(\eta)\}$, et que $\lambda(\eta)$ est une valeur propre simple de $A + \eta B$.

2e. Soit $v_0 \in \text{Ker}(\lambda_0 - A)$ tel que $\|v_0\|_{\mathcal{H}} = 1$, et $v_\eta = P_\eta v_0$. Montrer que

$$(v_\eta, (A + \eta B)v_\eta)_{\mathcal{H}} = \lambda(\eta)\|v_\eta\|^2_{\mathcal{H}},$$

et en déduire que la fonction $\eta \mapsto \lambda(\eta)$ est analytique réelle au voisinage de 0. Exprimer $\lambda'(0)$ en fonction de v_0 et B.

Partie II. Perturbations non-linéaires

Soit $Z \in \mathbb{N}^*$. On note E la fonctionnelle de type Thomas-Fermi-von Weizsäcker définie sur $H^1(\mathbb{R}^3)$ par

$$E(v) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |\nabla v|^2 + \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} |v|^4 - Z\int_{\mathbb{R}^3} \frac{v(x)^2}{|x|}\,dx + \frac{1}{2}D(v^2, v^2),$$

où

$$D(f,g) = \int_{\mathbb{R}^3}\int_{\mathbb{R}^3} \frac{f(x)\,g(y)}{|x-y|}\,dx\,dy.$$

Noter qu'on a remplacé l'exposant $p = 5/3$ par l'exposant $p = 4$ pour faciliter certains des calculs ci-dessous.

Pour $W \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, on considère le problème de minimisation

$$\mathcal{E}(W) = \inf\left\{E(v) + \int_{\mathbb{R}^3} Wv^2,\ v \in H^1(\mathbb{R}^3),\ \int_{\mathbb{R}^3} v^2 = Z\right\}. \tag{1}$$

Question 4.

4a. Montrer que pour tout $W \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$, $\mathcal{E}(W) > -\infty$.

4b. Exhiber une fonction $W \in L^2(\mathbb{R}^3) + L^\infty(\mathbb{R}^3)$ pour laquelle (1) n'a pas de minimiseur.

4c. Montrer que pour tout $W \in L^2(\mathbb{R}^3)$, le problème (1) admet un minimiseur u_W vérifiant $u_W \in H^2(\mathbb{R}^3)$ et $u_W > 0$ sur $\mathbb{R}^3$, et que les deux seuls minimiseurs de (1) sont u_W et $-u_W$.

Important ! On se contentera de donner les grandes étapes de la preuve et on ne détaillera que les points qui diffèrent du cas $W = 0$ traité en cours. Cette question sera notée sur 3 points seulement.

4d. Montrer que la fonctionnelle $W \mapsto \mathcal{E}(W)$ est concave sur $L^2(\mathbb{R}^3)$.

Question 5. Soit u_0 l'unique minimiseur positif de (1) pour $W = 0$ et a_0 la forme bilinéaire symétrique sur $H^1(\mathbb{R}^3)$ définie par

$$a_0(u,v) = \frac{1}{2}\int_{\mathbb{R}^3} \nabla u \cdot \nabla v + \int_{\mathbb{R}^3}\left(u_0^2 - \frac{z}{|\cdot|} + u_0^2 \star |\cdot|^{-1} + \theta_0\right) uv.$$

5a. Montrer que, si on le définit sur un domaine $C_c^\infty(\mathbb{R}^3) \subset D(H_0) \subset L^2(\mathbb{R}^3)$ que l'on précisera, l'opérateur

$$H_0 = -\frac{1}{2}\Delta + u_0^2 - \frac{Z}{|\cdot|} + u_0^2 \star |\cdot|^{-1}$$

est auto-adjoint sur $L^2(\mathbb{R}^3)$ et borné inférieurement, et que $\sigma_{\mathrm{ess}}(H_0) = \mathbb{R}_+$. On peut montrer que H_0 admet au moins une valeur propre strictement négative, et on note $-\theta_0$ sa plus petite valeur propre. Montrer que cette valeur propre est simple et que u_0 vérifie

$$H_0 u_0 = -\theta_0 u_0.$$

Que peut-on en déduire sur la régularité de u_0 ?

5b. Montrer que a_0 est continue, et positive au sens où

$$\forall u \in H^1(\mathbb{R}^3), \quad a_0(u,u) \geq 0,$$

mais n'est pas définie positive, ni *a fortiori* coercive.

5c. Montrer qu'il existe une constante $C \in \mathbb{R}_+$ telle que

$$\forall u \in H^1(\mathbb{R}^3), \quad a_0(u,u) \geq \frac{1}{4}\|\nabla u\|^2_{L^2(\mathbb{R}^3)} - C\|u\|^2_{L^2(\mathbb{R}^3)}.$$

5d. Soit

$$V = \left\{ v \in H^1(\mathbb{R}^3) \mid \int_{\mathbb{R}^3} u_0 v = 0 \right\}.$$

Vérifier que V est un sous-espace fermé de $H^1(\mathbb{R}^3)$ et que

$$\forall v \in V, \quad a_0(v,v) \geq \beta \|v\|^2_{L^2(\mathbb{R}^3)},$$

où β est un réel strictement positif que l'on reliera au spectre de H_0.

5e. Déduire des deux questions précédentes que a_0 est coercive sur V.

5f. Montrer que la forme bilinéaire symétrique a sur $H^1(\mathbb{R}^3)$ définie par

$$a(u,v) = a_0(u,v) + 2\int_{\mathbb{R}^3} u_0^2 uv + 2D(u_0 u, u_0 v)$$

est continue et coercive sur V.

On rappelle le théorème des fonctions implicites (dans la version que nous allons utiliser ci-dessous). Si X est un espace vectoriel normé, $x \in X$ et $r > 0$, on note $B_X(x,r) := \{x' \in X \mid \|x - x'\|_X < r\}$ la boule ouverte de X, centrée en x et de rayon r. Soit X, Y, Z trois espaces de Hilbert, $F : X \times Y \to Z$ une fonction de classe C^1, et $y_0 \in Y$ tel que $F(0, y_0) = 0$. Soit G la fonction de classe C^1 de Y dans Z définie par

$$\forall y \in Y, \quad G(y) = F(0,y).$$

On suppose que $G'(y_0)$, la différentielle de G au point y_0, définit un isomorphisme bicontinu de Y dans Z. Alors, il existe $\epsilon > 0$, $\eta > 0$ et une fonction $x \mapsto \Phi(x)$ de classe C^1 de $B_X(0,\epsilon)$ dans $B_Y(y_0,\eta)$ telle que $\Phi(0) = y_0$ et telle que pour tout $x \in B(0,\epsilon)$,

$$(y \in B(0,\eta) \text{ et } F(x,y) = 0) \quad \Leftrightarrow \quad (y = \Phi(x)).$$

De plus la différentielle de Φ en 0 est l'unique solution de l'équation

$$G'(y_0)\Phi'(0) + g'(0) = 0,$$

où $g'(0)$ est la différentielle en 0 de la fontion de X dans Z définie par $x \mapsto F(x, y_0)$.

Question 6.

6a. Vérifier que tout pour $W \in L^2(\mathbb{R}^3)$, les équations vérifiées par u_W et le multiplicateur de Lagrange θ_W peuvent s'écrire

$$F(W, u_W, \theta_W) = 0,$$

où F est la fonction de $L^2(\mathbb{R}^3) \times H^1(\mathbb{R}^3) \times \mathbb{R}$ à valeurs dans $H^{-1}(\mathbb{R}^3) \times \mathbb{R}$ définie par $\forall (W,u,\theta) \in L^2(\mathbb{R}^3) \times H^1(\mathbb{R}^3) \times \mathbb{R}$,

$$F(W,u,\theta) = \left(-\frac{1}{2}\Delta u + u^3 - \frac{Z}{|\cdot|}u + Wu + (u^2 \star |\cdot|^{-1})u + \theta u, \int_{\mathbb{R}^3} u^2 - Z \right).$$

6b. Montrer que la fonction F est de classe C^1 sur $L^2(\mathbb{R}^3) \times H^1(\mathbb{R}^3) \times \mathbb{R}$.

6c. Soit G la fonctionnelle de $H^1(\mathbb{R}^3) \times \mathbb{R}$ dans $H^{-1}(\mathbb{R}^3) \times \mathbb{R}$ définie par

$$\forall (u,\theta) \in H^1(\mathbb{R}^3) \times \mathbb{R}, \quad G(u,\theta) = F(0,u,\theta).$$

On note A la différentiable de G au point (u_0, θ_0). Montrer que A définit un isomorphisme bicontinu de $H^1(\mathbb{R}^3) \times \mathbb{R}$ dans $H^{-1}(\mathbb{R}^3) \times \mathbb{R}$.

6d. Déduire du théorème de fonctions implicites que $W \mapsto (u_W, \theta_W)$ est une fonction de $L^2(\mathbb{R}^3)$ dans $H^1(\mathbb{R}^3) \times \mathbb{R}$ de classe C^1 au voisinage de $W = 0$.

6e. Proposer une méthode de calcul de $\langle \mathcal{E}'(0), W \rangle$.